

VISIT...

LANZAROTE
Caliente.com

ЭРВИН ШРЕДИНГЕР

ИЗБРАННЫЕ ТРУДЫ
ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

ОСНОВОПОЛАГАЮЩИЕ РАБОТЫ
ПО ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКЕ
1926–1927 гг.

РАБОТЫ РАЗНЫХ ЛЕТ
ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ
МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ ВОПРОСЫ
КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ



ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»

МОСКВА 1976

СЕРИЯ «КЛАССИКИ НАУКИ»

Серия основана академиком *С. И. Вавиловым*

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

А. П. Виноградов (председатель),

*Б. Н. Делоне, Н. М. Жаворонков, А. А. Имшенецкий, С. П. Капица,
Б. М. Кедров, А. Н. Колмогоров, Б. В. Куаркин, С. Р. Микулинский,
Ф. А. Петровский, Л. С. Полак, Я. А. Смородинский, Н. А. Фигуровский,
А. Н. Фрумкин, Р. В. Хохлов, И. И. Шафрановский, А. Л. Яншин*

Шредингер Э. Избранные труды по квантовой механике. М.,
«Наука», 1976 г., 422 с.

В настоящем издании помещены основные работы Э. Шредингера по квантовой механике и связанным с ней вопросам.

Книга рассчитана на физиков — научных работников, аспирантов, студентов, а также химиков, историков науки и других специалистов, интересующихся проблемами теоретической физики.

Ответственный редактор

доктор физико-математических наук

Л. С. ПОЛАК



ОТ РЕДАКТОРА

Работы замечательного австрийского физика Эрвина Шредингера (1887—1961) представляют большой интерес для широкого круга читателей. Уравнение Шредингера известно всем, кто сколько-нибудь серьезно интересуется строением и закономерностями атомов и молекул. Э. Шредингером сформулированы основные математические положения, относящиеся к введенной им функции ψ , без которой нельзя представить современную квантовую механику и поистине бесчисленные ее научные и технические приложения. Он развил и разработал также многие разделы квантовой механики, например теорию возмущений и др.

Работы Э. Шредингера, наряду с трудами Л. де Бройля, В. Гейзенберга, М. Борна, П. Дирака, В. Паули, создали новую эпоху в физике. Годы возникновения квантовой механики (1924—1927) являются переломными в развитии физики.

Э. Шредингеру принадлежит большое число научных работ по различным проблемам физики, статьи и книги, излагающие и популяризирующие труднейшие вопросы современной науки, а также несколько книг методологического и философского характера.

В настоящем издании представлены в основном труды Шредингера по квантовой механике, одним из основоположников которой он является, и некоторые работы, так или иначе связанные с ней.

Сам Шредингер называл развитый им математический аппарат волновой механикой; выпуская в свет сборник своих основных работ, он так и озаглавил его «*Abhandlungen zur Wellenmechanik*». Однако это название не удержалось в науке. Сам Шредингер показал, что «волновой» и «матричный» аспекты квантовой механики эквивалентны. Они и составляют основное содержание квантовой механики. Поэтому мы назвали предлагаемое вниманию читателя собрание трудов Э. Шредингера «Избранные труды по квантовой механике».

ОСНОВОПОЛАГАЮЩИЕ РАБОТЫ ПО ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКЕ

1926—1927 гг.

КВАНТОВАНИЕ КАК ЗАДАЧА О СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЯХ¹

Первое сообщение

§ 1. В этом сообщении я собираюсь показать, на простейшем примере нерелятивистского свободного атома водорода, что обычные правила квантования могут быть заменены другими положениями, в которых уже не вводится каких-либо «целых чисел». Целочисленность получается при этом единственным образом сама по себе подобно тому, как сама по себе получается целочисленность числа узлов при рассмотрении колеблющейся струны. Это новое представление может быть обобщено, и я думаю, что оно тесно связано с истинной природой квантования.

Обычная форма квантовых правил связана с уравнением в частных производных Гамильтона

$$H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = E. \quad (1)$$

Ищется решение этого уравнения, представляющее собой сумму функций, каждая из которых зависит только от одной из независимых переменных q .

Введем теперь вместо S новую неизвестную функцию ψ так, чтобы эта функция ψ имела вид произведения функций, зависящих только от одной координаты. Для этого положим

$$S = K \ln \psi. \quad (2)$$

Постоянную K приходится ввести из соображений размерности, согласно которым она должна обладать размерностью действия. Таким образом, получаем соотношение

$$H\left(q, \frac{K}{\psi}, \frac{\partial \psi}{\partial q}\right) = E. \quad (1')$$

Мы не будем искать решение уравнения (1'), а поставим следующую задачу. При пренебрежении изменениями массы уравнение (1') можно всегда свести, по крайней мере в случае одноэлектронной проблемы, к следующему

¹ *E. Schrödinger. Ann. Physik, 1926, 79, 361. См. также в кн.: Вариационные принципы механики. Под ред. Л. С. Полака. М., Физматгиз, 1959. Перевод А. М. Бродского.*

виду: квадратичная форма от функции ψ и ее первых производных равна нулю.

Ищем такую действительную во всем конфигурационном пространстве однозначную ограниченную и всюду дважды дифференцируемую функцию ψ , которая дает экстремальное значение интегралу от упомянутой квадратичной формы, распространенному по всему конфигурационному пространству*. Эта вариационная проблема и заменяет у нас квантовые условия.

Возьмем сначала H в виде функции Гамильтона кеплеровой проблемы и покажем, что выставленное требование может быть выполнено не для всех, а только для положительных и лишь для некоторых дискретных отрицательных значений E . Это означает, что названная вариационная проблема имеет непрерывную и дискретную области спектра собственных значений. Дискретная часть спектра соответствует бальмеровским термам, а непрерывная — энергиям движения по гиперболическим траекториям. Чтобы сохранялось численное соответствие, величину K следует приравнять $h/2\pi$.

Поскольку выбор системы координат является несущественным при установлении вариационных уравнений, воспользуемся прямоугольными декартовыми координатами. Тогда уравнение (1') будет записываться в нашем случае (e , m — заряд и масса электрона) следующим образом:

$$\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)^2 - \frac{2m}{K^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi^2 = 0, \quad (1'')$$

и наша вариационная проблема примет вид:

$$\delta J = \delta \iiint dx dy dz \left[\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)^2 - \frac{2m}{K^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi^2 \right] = 0. \quad (3)$$

Интеграл берется здесь по всему пространству. Обычным способом отсюда получаем

$$\frac{1}{2}\delta J = \int df \delta\psi \frac{\partial\psi}{\partial n} - \iiint dx dy dz \delta\psi \left[\Delta\psi + \frac{2m}{K^2}\left(E + \frac{e^2}{r^2}\right)\psi \right] = 0. \quad (4)$$

Следовательно, должно быть, во-первых, справедливо уравнение

$$\Delta\psi + \frac{2m}{K^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\psi = 0, \quad (5)$$

и, во-вторых, должен равняться нулю распространенный по всей бесконечно удаленной замкнутой поверхности интеграл

$$\int df \delta\psi \frac{\partial\psi}{\partial n} = 0. \quad (6)$$

(Из (6) следует, что мы должны наложить дополнительное условие, касающееся поведения $\delta\psi$ в бесконечности, если хотим действительно получить упомянутый выше непрерывный спектр. На данном вопросе мы еще специально остановимся ниже.)

* Я не упускаю из вида, что подобная формулировка не является вполне однозначной (в настоящем издании звездочками обозначены примечания Э. Шредингера, а цифрами в квадратных скобках — комментарии).

Уравнение (5) можно решить, например, в сферических координатах r, ϑ, φ , представив ψ в виде произведения функций от r, ϑ и φ . Этот метод решения общеизвестен. Зависимость от углов будет выражаться шаровой функцией, зависимость от радиуса r (соответствующую функцию мы обозначим через χ) можно получить без труда из дифференциального уравнения

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \chi}{\partial r} + \left(\frac{2mE}{K^2} + \frac{2me^2}{K^2 r} - \frac{n(n+1)}{r^2} \right) \chi = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

Как известно, n должно быть обязательно целым, в противном случае зависимость от полярных углов не будет однозначной. Нам нужны лишь решения (7), которые остаются конечными для всех положительных действительных значений r . Уравнение (7) имеет на комплексной r -плоскости две особенности при $r=0$ и при $r=\infty$, причем лишь во второй из них, $r=\infty$, все интегралы уравнения будут иметь существенно особую точку*. Эти две особые точки являются граничными для нашего действительного интервала изменения r . Как известно, в подобном случае требование ограниченности в граничных точках для функции χ равносильно наложению граничного условия. Уравнение, вообще говоря, может не иметь ни одного интеграла, остающегося ограниченным в обеих этих точках; подобный интеграл существует лишь при некоторых специальных значениях входящих в уравнения постоянных. Эти специальные значения следует определить.

Рассмотренные выше положения составляют основное содержание всего исследования.

Изучим прежде всего поведение решения в особой точке $r=0$. Так называемое «определяющее уравнение», характеризующее поведение интеграла в особой точке, будет в данном случае иметь вид

$$\rho(\rho-1) + 2\rho - n(n+1) = 0, \quad (8)$$

причем его корни равны

$$\rho_1 = n, \quad \rho_2 = -(n+1). \quad (8')$$

Оба канонических интеграла будут содержать в этой точке n и, соответственно, $-(n+1)$ в показателе степени. Из положительности n следует, что для нашей цели пригоден лишь первый из этих интегралов, который может быть представлен в виде степенного ряда, начинающегося с r^n , поскольку он соответствует большему значению степени n . (Второй, не интересующий нас интеграл, соответствующий меньшему значению корня определяющего уравнения, может при разложении содержать логарифмический член, поскольку разность $-(n+1) - n$ целочисленна.) Так как ближайшая особая точка лежит в бесконечности, ряд, соответствующий взятому нами первому интегралу, везде сходится и представляет собой целую трансцендентную

* Я глубоко благодарен Герману Вейлю за его помощь в решении уравнения (7). В дальнейшем за подтверждением не доказанных в самой работе утверждений я отсылаю к книге: J. Schlesinger. Differentialgleichungen (Sammlung Schubert, N 13, Göschen, 1900, особенно главы 3 и 5).

функцию. Мы установили, таким образом, что искомое решение представляет собой определенную с точностью до несущественного постоянного множителя однозначную целую трансцендентную функцию, соответствующую при $r=0$ показателю степени n .

Теперь нужно исследовать поведение этой функции при стремлении r к бесконечности по положительной действительной оси. Для этого сделаем в уравнении (7) подстановку

$$\chi = r^\alpha U, \quad (9)$$

где α подобрано таким образом, чтобы исключить в уравнении (7) слагаемое, содержащее множитель $1/r^2$. Как нетрудно проверить, величина α при этом должна равняться или n , или $-(n+1)$, а уравнение (7) примет форму

$$\frac{d^2 U}{dr^2} + \frac{2(\alpha+1)}{r} \frac{dU}{dr} + \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) U = 0. \quad (7')$$

Двум интегралам этого уравнения при $r=0$ соответствуют показатели степени 0 и $-2\alpha-1$.

При $\alpha=n$ первый из этих интегралов, а при $\alpha=-(n+1)$ второй интеграл будут соответствовать, согласно (9), нашей искомой целой трансцендентной функции, которая является однозначной. Не теряя общности, мы можем, следовательно, ограничиться одним из двух значений α . Выберем значени

$$\alpha = n. \quad (10)$$

Решению U при этом будет соответствовать при $r=0$ показатель степени, равный нулю. Уравнение (7') принадлежит к типу уравнений Лапласа, общий вид которых такой:

$$U'' + \left(\delta_0 + \frac{\delta_1}{r} \right) U' + \left(\varepsilon_0 + \frac{\varepsilon_1}{r} \right) U = 0. \quad (7'')$$

В нашем случае входящие сюда постоянные равны

$$\delta_0 = 0, \quad \delta_1 = 2(\alpha+1), \quad \varepsilon_0 = \frac{2mE}{K^2}, \quad \varepsilon_1 = \frac{2me^2}{K^2}. \quad (11)$$

Этот тип уравнений сравнительно легко поддается рассмотрению, так как преобразование Лапласа, в общем случае не меняющее порядка уравнения, сводит в данном случае уравнение (7'') к уравнению первого порядка, которое в свою очередь разрешимо в квадратурах. Это позволяет выразить решение уравнения (7'') в виде интеграла на комплексной плоскости [1]. Я привожу здесь конечный результат *. Выражение

$$U = \int_L e^{zr} (z - c_1)^{\alpha_1-1} (z - c_2)^{\alpha_2-1} dz \quad (12)$$

* См. предыдущее примечание. Теория этого уравнения развита А. Пуанкаре и Горном (Г. Норм).

является решением уравнения (7''), если путь интегрирования L выбран так, чтобы имело место равенство

$$\int_L \frac{d}{dz} [e^{zr} (z - c_1)^{\alpha_1} (z - c_2)^{\alpha_2}] dz = 0. \quad (13)$$

Константы $c_1, c_2, \alpha_1, \alpha_2$ имеют следующие значения: c_1 и c_2 представляют собой корни квадратного уравнения

$$z^2 + \delta_0 z + \varepsilon_0 = 0, \quad (14)$$

а α_1 и α_2 определяются формулами

$$\alpha_1 = \frac{\varepsilon_1 + \delta_1 c_1}{c_1 - c_2}, \quad \alpha_2 = \frac{\varepsilon_1 + \delta_1 c_2}{c_2 - c_1}. \quad (14')$$

Таким образом, в частном случае уравнения (7') согласно (11) и (10)

$$\begin{aligned} c_1 &= +\sqrt{\frac{-2mE}{K^2}}, & c_2 &= -\sqrt{\frac{-2mE}{K^2}}, \\ \alpha_1 &= \frac{me^2}{K\sqrt{-2mE}} + n + 1, & \alpha_2 &= -\frac{me^2}{K\sqrt{-2mE}} + n + 1. \end{aligned} \quad (14'')$$

Интегральное представление (12) позволяет не только изучить асимптотическое поведение общей совокупности решений уравнения (7') при r , стремящемся к бесконечности, но и дает возможность исследовать некоторое определенное решение, что всегда значительно труднее.

Мы исключим пока тот случай, при котором постоянные α_1 и α_2 равны действительным целым числам. Это равенство имеет место (причем всегда одновременно для обеих постоянных) лишь тогда, когда выполняется условие

$$\frac{me^2}{K\sqrt{-2mE}} = \text{действительному целому числу}. \quad (15)$$

Таким образом, мы считаем, что равенство (15) не выполняется.

Поведение совокупности решений при стремлении r к бесконечности по определенному пути (в нашем случае r стремится к бесконечности всегда по положительной действительной оси) определяется поведением двух линейно независимых решений, которые получаются при следующих двух особо подобранных путях интегрирования L и которые мы обозначим через U_1 и U_2 *. По обоим путям интегрирования z выходит из бесконечности и возвращается обратно в таком направлении, что имеет место соотношение

$$\lim_{z \rightarrow \infty} e^{zr} = 0, \quad (16)$$

т. е. действительная часть zr стремится к $-\infty$. Вследствие этого выполняется условие (13). При этом в одном случае (решение U_1) обходится один раз точка c_1 , а в другом случае (решение U_2) — точка c_2 .

* В том случае, когда выполняется равенство (15), по крайней мере один из описанных в тексте путей интегрирования не может быть использован, так как соответствующий интеграл равняется при этом нулю.

Оба эти решения при достаточно больших положительных действительных значениях r имеют следующие асимптотические (в смысле Пуанкаре) представления:

$$\begin{aligned} U_1 &\sim e^{c_1 r} r^{-\alpha_1} (-1)^{\alpha_1} (e^{2\pi i \alpha_1} - 1) \Gamma(\alpha_1) (c_1 - c_2)^{\alpha_2 - 1}, \\ U_2 &\sim e^{c_2 r} r^{-\alpha_2} (-1)^{\alpha_2} (e^{2\pi i \alpha_2} - 1) \Gamma(\alpha_2) (c_2 - c_1)^{\alpha_1 - 1}, \end{aligned} \quad (17)$$

причем мы ограничились здесь первыми членами асимптотических разложений по возрастающим целым отрицательным степеням.

Рассмотрим, далее, раздельно случаи $E > 0$ и $E < 0$.

1. $E > 0$. Прежде всего отметим, что в этом случае равенство (15) автоматически не выполняется, так как величина $\sqrt{-2mE}$ является чисто мнимой. Согласно (14'') чисто мнимыми будут значения c_1 и c_2 . Таким образом, поскольку r действительно, экспоненциальные функции в формуле (17) являются ограниченными периодическими функциями. Принимая также значения α_1 и α_2 , можно из (14) получить, что оба решения U_1 и U_2 вблизи нуля пропорциональны r^{-n-1} . То же должно иметь место и для исследуемого нами случая целого трансцендентного U , поскольку последнее всегда может быть составлено из некоторой линейной комбинации U_1 и U_2 . Соотношение (9) вместе с (10) показывает, далее, что функция χ , т. е. целое трансцендентное решение исходного уравнения (7), все еще пропорциональна $1/r$ вблизи нуля, так как χ можно получить умножением U на r^n . Иначе говоря, имеет место следующее утверждение: *эйлеровское дифференциальное уравнение (5) нашей вариационной задачи имеет при всех положительных значениях E решения, которые во всем пространстве однозначны, ограничены, непрерывны и стремятся к нулю как $1/r$, все время непрерывно осциллируя.* На поверхностном условии (6) мы еще должны будем остановиться особо.

2. $E < 0$. В данном случае заранее не очевидно, что равенство (15) не имеет места, но мы все же вначале предположим это. Тогда согласно формулам (14'') и (17), функция U_1 неограниченно возрастает при $r \rightarrow \infty$, а функция U_2 , наоборот, экспоненциально стремится к нулю. Исследуемое целое трансцендентное U (так же, как и χ) останется тогда и только тогда ограниченным, когда оно будет совпадать с точностью до численного коэффициента с решением U_2 . Это, однако, не имеет места, что можно проверить следующим образом: выбираем в выражении (12) замкнутый путь интегрирования L , обходящий обе точки c_1 и c_2 ; этот путь будет действительно замкнутым на римановой плоскости подынтегрального выражения из-за целочисленности суммы $\alpha_1 + \alpha_2$; следовательно, условие (13) автоматически выполняется, после чего легко показать, что интеграл (12) представляет в данном случае нашу целую трансцендентную функцию U . Этот интеграл в самом деле можно разложить по положительным степеням r в ряд, который сходится, во всяком случае, при достаточно малых r , так что данный интеграл должен являться решением дифференциального уравнения (7'), совпадающим с U . Итак, решение U представляется с помощью (12), если за L взять замкнутый путь, обходящий точки c_1 и c_2 . Этот замкнутый путь можно аддитивно составить из частей рассмотренных ранее путей интегрирования, соответствующих U_1 и U_2 с не равными нулю коэффициентами, например 1 и $e^{2\pi i \alpha_1}$. Таким

образом, решение U действительно нельзя получить из одной функции U_2 , в него обязательно должна также входить функция U_1 .

Наше целое трансцендентное U не будет, следовательно, при сделанных предположениях и стремящемся к бесконечности r ограниченным. Не проводя пока полного исследования, т. е. не приводя доказательства того, что примененный способ дает все линейно независимые решения, мы можем высказать следующее положение: *для отрицательных E , не удовлетворяющих условию (15), рассматриваемая вариационная задача не имеет решения.*

Нам остается теперь рассмотреть лишь дискретную совокупность отрицательных значений E , для которых выполняется условие (15). Оба значения, α_1 и α_2 , будут при этом целочисленными. Из двух путей интегрирования, приводивших нас ранее к фундаментальной системе U_1, U_2 , первый должен быть, наверное, изменен, чтобы не получить равного нулю результата. Дело в том, что величина $\alpha_1 - 1$ безусловно положительна, так что точка c_1 не является ни точкой разветвления, ни полюсом подынтегрального выражения, которое в этой точке имеет обычный нуль. Точка c_2 тоже может стать регулярной, если $\alpha_2 - 1$ будет отрицательной. В каждом из этих случаев, однако, можно без труда подобрать два подходящих пути L и даже провести интегрирование в замкнутой форме с помощью обычных функций, тем самым вполне определив поведение решений. Пусть, в частности,

$$\frac{me^2}{K\sqrt{-2mE}} = l \quad (l = 1, 2, 3, 4, \dots). \quad (15')$$

Тогда согласно (14'') имеют место равенства

$$\alpha_1 - 1 = l + n, \quad \alpha_2 - 1 = -l + n. \quad (14''')$$

Рассмотрим отдельно случаи $l \leq n$ и $l > n$. Пусть

а) $l \leq n$. При этом обе точки, c_2 и c_1 , теряют свой сингулярный характер, благодаря чему появляется возможность использовать их в качестве начального или конечного пункта пути интегрирования L без нарушения условия (13). Третьей, удовлетворяющей нашим требованиям, граничной точкой является отрицательная бесконечность. Формула (12) при любом из путей интегрирования между двумя из этих трех точек даст решение уравнения, причем среди этих решений только два будут линейно независимыми, как это можно легко проверить, вычислив соответствующие интегралы в замкнутой форме. В частности, целое трансцендентное решение может быть получено при интегрировании от c_1 до c_2 . Без каких-либо вычислений ясно, что этот интеграл остается регулярным при $r=0$. Я это подчеркиваю в связи с тем, что фактическое вычисление интеграла в данном случае только усложняет рассмотрение. Наоборот, для выяснения поведения интеграла при стремящихся к бесконечности значениях r удобно провести интегрирование; при этом оказывается, что ограниченным при $r \rightarrow \infty$ остается лишь тот из двух линейно независимых интегралов, который при $r=0$ равен бесконечности. Таким образом, при $l \leq n$ задача не имеет решения.

б) $l > n$. Тогда согласно формуле (14''') точка c_1 будет нулем, а точка c_2 — полюсом по меньшей мере первого порядка для подынтегрального

выражения. Два независимых решения могут быть получены здесь следующим образом: в одном случае используется путь интегрирования L , идущий из точки $z = -\infty$ к нулю для предосторожности с обходом полюса; другой путь оканчивается в полюсе. Последний путь приводит к целому трансцендентному решению, умноженному на r^n , значение которого мы выписываем, не приводя вычислений (напоминаем при этом, что умножение U на r^n возвращает нас к функции χ):

$$\chi = f\left(r \frac{\sqrt{-2mE}}{K}\right); \quad f(x) = x^n e^{-x} \sum_{k=0}^{l-n-1} \frac{(-2x)^k}{k!} \binom{l+n}{l-n-1-k}. \quad (18)$$

Это решение является пригодным, поскольку оно остается ограниченным при всех действительных положительных значениях r . Благодаря тому, что оно экспоненциально исчезает в бесконечности, выполняется также условие (6). Объединим результаты, полученные для отрицательных значений E следующим образом.

При отрицательных E наша вариационная задача имеет решения тогда и только тогда, когда значение E удовлетворяет условию (15). При этом целое число n , соответствующее номеру используемой в решении шаровой функции, должно принимать значения меньшие, чем l , что может быть всегда выполнено, по крайней мере, одним способом. Входящая в решение функция, зависящая от r , определяется при этом уравнением (18).

Подсчет числа постоянных в шаровой функции показывает, что найденное решение содержит при допустимых комбинациях (n, l) ровно $2n+1$ произвольных постоянных; при заданном значении l число произвольных постоянных равно, таким образом, l^2 .

Мы тем самым в основном подтвердили выставленные в начале статьи утверждения о свойствах спектра собственных значений нашей вариационной задачи, но доказательство еще нельзя считать полным.

Нужно, во-первых, еще показать полноту всей использованной системы собственных функций. Этим вопросом в данной статье я заниматься не буду. Согласно другим исследованиям можно предположить, что мы не пропустили какого-либо собственного значения [2].

Во-вторых, следует здесь напомнить, что использованные для положительных значений E собственные функции не являются действительными решениями поставленной нами вначале проблемы, поскольку при $r \rightarrow \infty$ значение ϕ стремится к нулю лишь как $1/r$, а значение $\partial\phi/\partial r$ — как $1/r^2$. Поверхностный интеграл (6) будет поэтому в бесконечности иметь порядок $\delta\phi$. Если желательно строго получить непрерывный спектр, то при постановке задачи нужно добавить то условие, что значение $\delta\phi$ в бесконечности равно нулю или, по крайней мере, стремится к постоянной величине, не зависящей от направления, по которому происходит стремление к бесконечности; в последнем случае поверхностный интеграл (6) обратится в нуль из-за свойств входящих в решение шаровых функций.

§ 2. Из условия (15) следует, что

$$-E_l = \frac{me^4}{2K^2 l}. \quad (19)$$

Таким образом, мы получаем известные уровни энергии Бора, соответствующие бальмеровским термам, если положим введенную по соображениям размерности величину

$$K = \frac{h}{2\pi}. \quad (20)$$

Тогда будет иметь место соотношение

$$-E_l = \frac{2\pi^2 me}{h^2 l^2}. \quad (19')$$

Здесь l является главным квантовым числом, $n+1$ аналогично азимутальному квантовому числу; при более подробном определении шаровых функций мы сможем расщепить это число на величины, сопоставленные «экваториальному» и соответственно «полярному» кванту. Эти величины характеризуют здесь систему узловых линий на сфере. «Радиальное квантовое число» $l-n-1$ определяет в свою очередь число «узловых сфер», так как нетрудно убедиться, что функция $f(x)$ в (18) имеет ровно $l-n-1$ положительных действительных корней. Положительные значения E соответствуют континууму гиперболических траекторий, которым можно, в известном смысле, сопоставить значение радиального квантового числа, равное ∞ . С этим согласуется поведение решения при $E > 0$, которое, как мы видели, стремится к бесконечности, непрерывно осциллируя.

Интересно также отметить, что область, внутри которой функция (18) заметно отличается от нуля, определяется по порядку величины большой осью соответствующего эллипса. Обратная величина множителя, который входит у нас в качестве коэффициента перед r в аргументе безразмерной функции f , имеет, очевидно, размерность длины, а ее значение равно

$$\frac{K}{\sqrt{-2mE}} = \frac{K^2 l}{me^2} = \frac{h^2 l}{4\pi^2 me^2} = \frac{a_l}{l}, \quad (21)$$

где a_l — длина полуоси эллипса, соответствующего l -й траектории. Равенство (21) следует из формулы (19) и известного соотношения $E_l = -e^2/2a_l$. Выражение (21) определяет порядок величины искомой области при малых l и n , так как тогда можно принять, что корни $f(x)$ мало отличаются от единицы. Этого не будет, когда коэффициенты полиномов станут большими числами. Я не могу сейчас рассмотреть вопрос о значениях корней подробнее, но, по-видимому, приведенное утверждение следует считать приблизительно правильным.

§ 3. Довольно естественно связывать функцию ψ с некоторым колебательным процессом в атоме [3], в котором реальность электронных траекторий в последнее время неоднократно подвергалась сомнению. Я сначала тоже хотел обосновать новое понимание квантовых правил, используя указанный сравнительно наглядный путь, но потом предпочел рассмотренный в статье чисто математический способ, так как он дает возможность лучше выяснить все существенные стороны вопроса. Существенным мне кажется то, что квантовые правила не вводятся больше как загадочное «требование целочисленности», а определяются необходимостью ограниченности и однозначности некоторой определенной пространственной функции.

Я не считаю возможным, до тех пор пока не будут успешно рассчитаны

новым способом более сложные задачи, подробнее рассматривать истолкование введенного колебательного процесса. Не исключена возможность, что подобные расчеты приведут к простому совпадению с выводами обычной квантовой теории. Например, при рассмотрении по приведенному способу релятивистской задачи Кеплера, если действовать по указанным вначале правилам, получается замечательный результат: полуцелые квантовые числа (радиальное и азимутальное) [4].

Все же можно позволить несколько замечаний об истолковании приведенных положений. Прежде всего, нельзя не упомянуть, что основным исходным толчком, который привел к появлению приведенных здесь рассуждений, была диссертация де Бройля *, содержащая много глубоких идей, а также размышлений о пространственном распределении «фазовых волн», которым, как показано де Бройлем, всякий раз соответствует периодическое или квазипериодическое движение электрона, если только эти волны укладываются на траектории целое число раз. Главное отличие от теории де Бройля, в которой говорится о прямолинейно распространяющейся волне, заключается здесь в том, что мы рассматриваем, если использовать волновую трактовку, стоячие собственные колебания. Я недавно показал **¹, что, рассматривая подобные стоячие собственные колебания и пользуясь законом де Бройля дисперсии фазовых волн, можно обосновать теорию газов Эйнштейна. Предыдущее изложение является в свою очередь как бы обобщением рассуждений, приведенных в связи с упомянутой газовой моделью [5].

Если связывать одну из функций (18) (после умножения на шаровую функцию n -го порядка) с некоторым собственным колебанием, то тогда величина E должна быть как-то связана с частотой этого процесса. Обычно в подобных случаях колебательных процессов «параметр» (чаще всего обозначаемый через λ) пропорционален квадрату частоты. Но в нашем случае аналогичный подход привел бы для отрицательных значений E к мнимым значениям частоты и, кроме того, интуитивные соображения «квантового теоретика» говорят, что здесь должна иметь место пропорциональность значения E самой частоте, а не ее квадрату.

Противоречие разрешается следующим образом. Для параметра E вариационного соотношения (5) предварительно не установлен какой-либо нулевой уровень, в особенности потому, что искомая функция ψ содержит множителем, кроме функции, куда входит E , еще функцию от r , к которой при изменении нулевого уровня прибавляется аддитивная постоянная. Следовательно, «теоретик колебательных процессов» должен ожидать, что квадрату частоты будет пропорционально не само E , а величина, измененная по сравнению с E на некоторую постоянную. Пусть эта постоянная очень велика по сравнению с суммой всех имеющихся отрицательных значений E (которые, как следует из формулы (15), конечны). Тогда соответствующие частоты будут действительны и их относительно малые изменения на самом деле окажутся приближенно пропорциональными E . Но именно это и требует «интуиция» квантового теоретика, поскольку нулевой уровень энергии

* *L. de Broglie. Ann. phys. (10), 1925, 3, 22 (Theses, Paris, 1924).*

** *Phys. Z. (находится в печати) [с. 172 наст. изд.].*

не является фиксированным. Данное истолкование, по которому частота колебания определяется с помощью соотношения

$$\nu = C' \sqrt{C + E} = C' \sqrt{C} + \frac{C'}{2\sqrt{C}} E + \dots, \quad (22)$$

где постоянная C много больше всех значений E , имеет еще то значительное преимущество, что позволяет разъяснить боровское условие для частот. Соответственно этому условию частота излучения пропорциональна разности энергий, т. е. согласно (22) пропорциональна разности между собственными частотами ν гипотетического колебательного процесса. Следовательно, хотя все собственные частоты много больше частот излучения, эти две величины тесно связаны друг с другом, причем последняя из них является как бы глубоким «разностным тоном» собственного колебания, протекающего со значительно большей частотой. То, что при переходе энергии от одного собственного колебания к другому появляется нечто (по моей трактовке, световая волна) с частотой, равной разности частот собственных колебаний, достаточно понятно; нужно лишь предположить, что световая волна причинно связана с биениями, появляющимися всегда при подобных переходах в любой точке пространства и что частота света определяется числом максимумов, через которые проходит наш колебательный процесс за секунду.

Может возникнуть мнение, что приведенные выводы основываются на соотношении (22) в его приближенном виде (после разложения корня), вследствие чего само условие частот Бора становится, очевидно, также приближенным [6]. Однако это заключение является ошибочным и будет полностью опровергнуто, если развить релятивистскую теорию, использование которой необходимо для глубокого понимания вопроса. Очевидно, большая аддитивная постоянная C тесно связана с энергией покоя электрона mc^2 . В релятивистской теории не потребуется также вторичного независимого введения постоянной $\hbar$ (которая была уже введена в формуле (20)) в условие частот. Однако свободное от оговорок релятивистское рассмотрение, к сожалению, встречает пока определенные трудности, затронутые выше.

Не требует особых разъяснений то обстоятельство, что представление, по которому при квантовом переходе энергия преобразуется из одной колебательной формы в другую, значительно более удовлетворительно, чем представление о перескакивающем электроны. Изменение формы колебания всегда может происходить непрерывно в пространстве и времени, оно может длиться время, равное определяемому экспериментально времени процесса излучения (ср. опыты с каналовыми лучами В. Вина) [7], так что собственные частоты и соответственно частота биения изменятся, если на сравнительно короткое время излучающий атом окажется в электрическом поле. Соответствующий экспериментальный факт приводил до сих пор, как известно, к большим теоретическим трудностям; это видно, например, из дискуссии Бора—Крамерса и Слетера [8].

Несмотря на все достигнутые успехи, нельзя все же забывать, что представление, по которому при отсутствии излучения атом находится в состоянии некоторого колебания с собственной частотой, все еще очень грубо от-

ражает фактически существующий колебательный процесс. Как известно, макроскопическая система ведет себя в данном случае совершенно другим образом, излучая все время смесь частот собственных колебаний. Однако не следует поспешно обращать особое внимание на этот факт, так как и в случае отдельного атома не исключена возможность существования совокупности собственных колебаний, причем частоты только этих колебаний совпадают с частотами, к испусканию которых атом способен при определенных условиях. Кроме того, допущение возможности одновременного действительного излучения одним и тем же атомом целого ряда определенных спектральных линий не противоречит опыту. Таким образом, вполне можно считать, что лишь в нормальном состоянии (и приближенно в «метастабильных состояниях») атом колеблется с одной частотой и именно по этой причине не излучает, так как не появляется никаких биений. Возбуждение состоит в дополнительном появлении еще одной или нескольких частот, благодаря чему возникают затем биения, вызывающие излучение света.

Можно, во всяком случае, принять, что собственные колебания с одним и тем же значением частоты возбуждаются одновременно. Кратные собственные значения соответствуют на языке существующей теории случаям вырождения. Квантование вырожденной системы связано с произвольным распределением энергии по колебаниям с одинаковыми собственными значениями.

Д о б а в л е н и е п р и к о р р е к т у р е 28/II 1926 г.

В случае классической механики консервативной системы можно сформулировать нашу вариационную задачу изящнее, чем это было здесь сделано, без непосредственной связи с уравнением Гамильтона, следующим образом. Пусть $T(q, p)$ — кинетическая энергия, зависящая от координат и импульсов, V — потенциальная энергия, $d\tau$ — «рационально измеренный» элемент объема конфигурационного пространства, т. е. произведение $dq_1 dq_2 \dots dq_n$, умноженное еще на квадратный корень из дискриминанта квадратичной формы $T(q, p)$ (ср.: Гиббс. Статистическая механика). Тогда значение функции ψ должно придавать «интегралу Гамильтона»

$$\int d\tau \left\{ K^2 T \left(q, \frac{\partial \psi}{\partial q} \right) + \psi^2 V \right\} \quad (23)$$

стационарное значение при дополнительном нормирующем условии

$$\int \psi^2 d\tau = 1. \quad (24)$$

Собственные значения этой вариационной проблемы, являющиеся, как известно, также стационарными значениями интеграла (23), дают согласно нашим предположениям квантовые уровни энергии.

Относительно формулы (14'') следует еще заметить, что величина α_2 в основном совпадает с известным выражением Зоммерфельда $-\frac{B}{\sqrt{A}} + \sqrt{C}$ (ср.: Atombau, 4 Aufl., S. 775) [9].

Поступило 27 января 1926 г.

КВАНТОВАНИЕ КАК ЗАДАЧА О СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЯХ¹

Второе сообщение*

§ 1. Оптико-механическая аналогия Гамильтона

Прежде чем заниматься решением квантовой задачи о собственных значениях для новых конкретных систем, мы подробнее осветим общую связь между дифференциальным уравнением Гамильтона (у. Г.) некоторой механической задачи и «соответствующим» волновым уравнением, т. е. в рассмотренном ранее частном случае связь кеплеровой задачи с уравнением (5) первого сообщения. Данная общая связь пока была лишь кратко выражена аналитическим образом посредством не ясного самого по себе преобразования (2) и столь же не ясного перехода от приравнивания нулю некоторого выражения к требованию того, чтобы пространственный интеграл от этого же выражения был стационарным**.

Внутренняя связь между теорией Гамильтона и волновыми процессами давно известна. Эта связь была ясна уже самому Гамильтону, она даже лежала в основе его теоретической механики, которую он строил, исходя из оптики неоднородных сред***. Вариационный принцип Гамильтона может рассматриваться как принцип Ферма для распространения волн в конфигурационном пространстве (q -пространстве); при этом у. Г. выражает здесь принцип Гюйгенса для данных волн. В большинстве современных изложений эти глубокие идеи Гамильтона теряют, к сожалению, свой яркий наглядный вид и сводятся к значительно более бесцветным аналитическим соотношениям****.

¹ *E. Schrödinger. Ann. Physik, 1926, 79, 489. См. также в кн.: Вариационные принципы механики. Под ред. Л. С. Полака. М., Физматгиз, 1959. Перевод А. М. Бродского.*

* Для понимания данной работы предварительное чтение первого сообщения не является необходимым.

** В этой статье мы в дальнейшем не будем придерживаться данного способа вычислений. Он должен служить лишь для предварительной ориентировки при установлении внешней связи волнового уравнения с у. Г. Функция ψ в действительности не находится в таком соотношении с функцией действия рассматриваемого движения, как это следует из формулы (2) первого сообщения. Напротив, связь между волновым уравнением и вариационной задачей очень проста: подынтегральное выражение стационарного интеграла представляет собой функцию Лагранжа волнового процесса.

*** Ср., например: *E. T. Whittaker. Analytische Dynamik*, Kap. 11, 1924, с. 306 и след.
**** Ф. Клейн излагает с лета 1891 г. в своих лекциях по механике теорию Якоби, исходя из квазиоптических рассуждений в неевклидовых пространствах высшего числа измерений. Ср.: *F. Klein. Jahresber. Deutsch. Math. Ver., 1891, 1; Z. Math. und Phys., 1901, 46; Ges. Abh., Bd. 2, S. 601, 603.* Во второй заметке Клейн с некоторой укоризной отмечает, что его доклад, сделанный десять лет назад перед собранием естествоиспытателей в Галле, в котором была изложена указанная связь и было подчеркнуто большое значение оптических работ Гамильтона, «не встретил внимания, которого я ожидал».

Я благодарен проф. Зоммерфельду за дружеское письменное указание на соображения Ф. Клейна. См.: *Atomabau*, 4 Aufl., S. 803 [1].

Рассмотрим общую задачу классической механики консервативной системы; у. Г. будет в этом случае иметь вид

$$\frac{\partial W}{\partial t} + T\left(q_k, \frac{\partial W}{\partial q_k}\right) + V(q_k) = 0, \quad (1)$$

где W — функция действия, т. е. интеграл по времени от функции Лагранжа $T - V$, взятый по некоторому пути движения системы и рассматриваемый как функция конечного положения и времени.

Символы q_k обозначают координаты; величина T , являющаяся кинетической энергией, представляет собой функцию координат и импульсов (квадратичную форму относительно последних); импульсы согласно известным правилам заменены в уравнении (1) на соответствующие частные производные $\partial W / \partial q_k$. Величина V соответствует потенциальной энергии. При решении уравнения (1) делается подстановка

$$W = -Et + S(q_k), \quad (2)$$

после чего уравнение (1) переходит в уравнение

$$2T\left(q_k, \frac{\partial W}{\partial q_k}\right) = 2(E - V). \quad (1')$$

Буквой E обозначена первая произвольная константа интегрирования, являющаяся, как известно, энергией системы. Мы сохранили в уравнении (1') функцию W , не заменив ее, как делается обычно, на не зависящую от времени функцию S . Это, однако, несущественно.

Согласно Герцу, смысл уравнения (1') можно выразить очень просто и наглядно, если рассмотреть конфигурационное пространство (пространство переменных q_k) с введенной в него с помощью кинетической энергии системы неевклидовой метрикой. Пусть T — кинетическая энергия, рассматриваемая в отличие от предыдущего случая не как функция импульсов, а как функция скоростей $\dot{q}_k$; тогда полагаем квадрат линейного элемента ds равным

$$ds^2 = 2T(q_k, \dot{q}_k) dt^2. \quad (3)$$

Правая сторона равенства (3) фактически не содержит dt , что видно после подстановки $\dot{q}_k dt = dq_k$, приводящей к квадратичной форме от dq_k .

Введенная метрика (3) определяет известным образом угол между двумя линейными элементами, дивергенцию и ротор от вектора, градиент и оператор Лапласа (div grad) от скаляра и т. д., совершенно подобно тому, как это обычно делается в трехмерном евклидовом пространстве, понятиями которого вообще можно здесь свободно пользоваться, заменяя лишь все время евклидов линейный элемент на несколько более сложный линейный элемент (3). Мы, таким образом, установили, что в дальнейшем все геометрические высказывания в q -пространстве следует понимать в этом неевклидовом смысле.

Одной из важнейших особенностей является то, что при вычислении нужно тщательно различать ковариантные и контравариантные компоненты векторов и тензоров. Это приводит, однако, не к большим осложнениям, чем, например, применение косоугольных декартовых координат.

Величины q_k являются прототипом контравариантного вектора. Зависящие от q_k коэффициенты в форме $2T$ имеют ковариантный характер; они образуют ковариантный фундаментальный тензор. Величина $2T$ является контравариантной формой, соответствующей форме $2T$, так как импульсы образуют компоненты ковариантного вектора, соответствующего контравариантному вектору $\dot{q}_k$. Левая сторона уравнения (1') представляет, следовательно, просто-напросто контравариантную фундаментальную форму, в которую в качестве переменных введены величины $\partial W / \partial q_k$, являющиеся по своему смыслу компонентами ковариантного вектора $\text{grad} W$.

Такой же смысл имеет переход в выражении кинетической энергии от скоростей к импульсам, поскольку ковариантные компоненты можно подставлять только в ковариантную форму, так как иначе не получится имеющего смысл выражения, т. е. инварианта.

Уравнение (1') совпадает, таким образом, с условием

$$(\text{grad } W)^2 = 2(E - V), \quad (1'')$$

или

$$|\text{grad } W| = \sqrt{2(E - V)}. \quad (1''')$$

Это условие можно легко проанализировать. Пусть найдена функция W (вида (2)), удовлетворяющая условию (1'''). Тогда эту функцию можно в каждом случае наглядно описать при каком-либо определенном значении t , изобразив семейство поверхностей $W = \text{const}$ в q -пространстве и поставив в соответствие каждой из них определенное значение W .

С одной стороны, как мы сейчас покажем, уравнение (1''') дает метод последовательного построения всех поверхностей постоянного уровня и метод определения соответствующих им значений W , если задана какая-либо одна из поверхностей $W = \text{const}$ и соответствующее ей значение W . С другой стороны, требующиеся при подобном построении исходные данные, а именно некоторая начальная поверхность и значение величины W могут быть заданы совершенно произвольно, после чего функция, удовлетворяющая уравнению (1'''), может быть построена двузначным образом. При этом мы пока считаем время постоянным. Таким образом, рассмотренный способ построения поверхностей постоянного уровня полностью исчерпывает содержание дифференциального уравнения, любое решение которого можно получить, исходя из соответствующим образом выбранной поверхности и некоторого значения W .

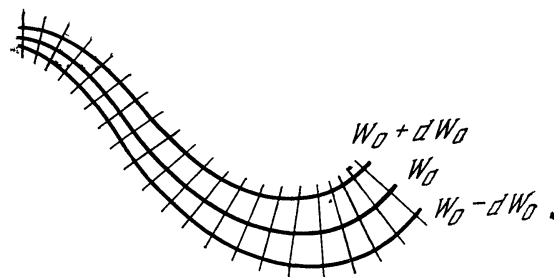
Перейдем теперь к изложенному способу построения. Пусть произвольной поверхности (см. рисунок) приписано значение функции W , равное W_0 . Чтобы найти поверхность постоянного уровня, соответствующую значению $W_0 + dW_0$, восстанавливаем в каждой точке исходной поверхности перпендикуляр

и откладываем на нем в положительном направлении (одну сторону мы заранее условливаемся считать положительной, а другую — отрицательной) длину

$$ds = \frac{dW_0}{\sqrt{2(E - V)}}. \quad (4)$$

Конечные точки перпендикуляров будут заполнять при этом поверхность $W_0 + dW_0$. Продолжая действовать подобным образом в положительном и отрицательном направлениях, можно последовательно построить все семейство поверхностей постоянного уровня.

Способ построения двузначен, поскольку можно переменить обозначение положительной и отрицательной сторон на исходной поверхности. Этого,



однако, нельзя сделать на дальнейших этапах построения ни на какой другой поверхности, так как производные по W должны быть непрерывными. Сверх того, оба получающихся семейства поверхностей постоянного уровня, очевидно, идентичны, и лишь приписанные им значения W изменяются в противоположных направлениях.

Если рассмотреть теперь чрезвычайно простую зависимость от времени t , то из уравнения (2) следует, что и для какого-либо более позднего (или более раннего) значения времени $t + t'$ распределение значений W будет представляться тем же самым семейством поверхностей постоянного уровня, что и при времени t ; нужно лишь всюду заменить значения W на $W + Et'$. Значения W , так сказать, сдвигаются по определенному простому закону от одной поверхности постоянного уровня к другой, причем при положительной величине E сдвиг происходит в сторону растущих значений W . Вместо этого можно также считать, что сдвигаются сами поверхности, причем каждая из них сохраняет свое значение W , но принимает форму и положение следующей поверхности семейства. Закон движения поверхностей определяется тем, например, что поверхность W_0 должна принять ко времени $t + \Delta t$ положение, которое занимала в момент t поверхность $W_0 + E \Delta t$. Этого можно достичь согласно формуле (4), сдвигая каждую точку поверхности W_0 в направлении положительной нормали на длину

$$ds = \frac{E \Delta t}{\sqrt{2(E - V)}}. \quad (5)$$

Это означает, что поверхности сдвигаются с нормальной скоростью

$$u = \frac{ds}{dt} = \frac{E}{\sqrt{2(E-V)}}, \quad (6)$$

которая после задания постоянной E является функцией только положения в пространстве.

Теперь очевидно, что нашу систему поверхностей $W = \text{const}$ можно рассматривать как систему волновых поверхностей поступательного стационарного волнового движения в q -пространстве, причем скорость движения в каждой точке пространства определяется посредством формулы (6). Дело в том, что наш метод построения можно, очевидно, заменить построением с помощью элементарных волн Гюйгенса (радиуса ds (5)) и их огибающих. «Коэффициент преломления» обратно пропорционален величине u (6) и зависит от положения, но не от направления. Таким образом, оптически q -пространство неоднородно, но изотропно. Элементарные волны являются сферами, причем сферами, как это следует здесь еще раз подчеркнуть, в смысле линейного элемента, определяемого формулой (3).

Функция действия W играет для нашей волновой системы роль фазы; у. Г. является выражением принципа Гюйгенса. Если сформулировать принцип Ферма в виде

$$0 = \delta \int_{P_1}^{P_2} \frac{ds}{u} = \delta \int_{P_1}^{P_2} \frac{ds \sqrt{2(E-V)}}{E} = \delta \int_{t_1}^{t_2} \frac{2T}{E} dt = \frac{1}{E} \delta \int_{t_1}^{t_2} 2T dt, \quad (7)$$

то мы прямо получаем принцип Гамильтона в форме Мопертюи (при интегрировании и варьировании имеет место равенство $T+V=E=\text{const}$). «Лучи», т. е. ортогональные траектории волновых поверхностей, являются также путями движения системы с энергией E согласно известным уравнениям

$$p_k = \frac{\partial W}{\partial q_k}, \quad (8)$$

из которых следует, что из каждой частной функции действия можно получить ряд путей движения системы, подобно тому как ток получается из своего потенциала скоростей *. (Импульсы p_k образуют, попросту говоря, ковариантный вектор скорости, причем из формулы (8) следует, что этот вектор равен градиенту от функции действия.)

Хотя в предыдущих рассуждениях говорится о волновых поверхностях, скорости распространения и принципе Гюйгенса, по существу рассматривается аналогия не между механикой и волновой оптикой, а аналогия между механикой и геометрической оптикой. Дело в том, что понятие луча, с которым главным образом связывается механика, является в основном понятием

* Ср. в особенности: *A. Einstein. Verhandl. Dtsch. phys. Ges.*, 1917, 19, 77, 82. Изложенное там понимание квантовых условий более всех из имевшихся ранее примыкает к предлагаемому в этой статье истолкованию. На цитированную работу ссылается также и де Бройль [2].

геометрической оптики и только в геометрической оптике имеет строгий смысл. Принцип Ферма также может быть истолкован в рамках геометрической оптики с использованием понятия о показателе преломления. Кроме того, система W -поверхностей, рассматриваемых как волновые поверхности, значительно слабее связана с механическим движением, поскольку изображающая механическую систему точка распространяется по лучу не с волновой скоростью u , а со скоростью, пропорциональной (при постоянном значении E) $1/u$. Из формулы (3) сразу получается для этой скорости значение

$$v = \frac{ds}{dt} = \sqrt{2T} = \sqrt{2(E - V)}. \quad (9)$$

Приведенное утверждение очевидно. Во-первых, из уравнений (8) следует, что скорость системы тем больше, чем больше $\text{grad } W$, т. е. больше там, где W -поверхности сближаются, или, что то же самое, где мало значение u . Во-вторых, величина W представляет собой, по определению, интеграл по времени от функции Лагранжа, вследствие чего эта величина изменяется во время движения (за время dt на $(T - V) dt$), так что мы не можем все время сопоставлять точке, изображающей систему, одни и те же W -поверхности.

Вообще не имеется механических параллелей для таких важнейших понятий волновой теории, как амплитуда, длина волны, частота, т. е. вообще для понятий, характеризующих форму волны; ничего нельзя сказать о самой волновой функции, лишь функции W можно придать для волн смысл фазы, весьма, впрочем, условно из-за неопределенности формы волны.

Если рассматривать весь приведенный параллелизм понятий только как любопытный наглядный способ выражения, то отсутствие полной аналогии не приводит к каким-либо затруднениям и стремление к последовательному проведению этого параллелизма не имеет смысла. Аналогия сохранялась бы в данном случае лишь с геометрической, или, самое большее, с весьма упрощенной волновой оптикой. Не изменяет положения вещей и то обстоятельство, что в случае света геометрическая оптика представляет лишь весьма грубое приближение. При попытке последовательного построения оптики в q -пространстве следовало бы, таким образом, для сохранения параллелизма заботиться о том *, чтобы не очень отклониться от предельного случая геометрической оптики, выбирая, например, длину волны настолько малой, чтобы она была много меньше всех размеров, определяющих передвижение системы. В этом случае подобная попытка не может привести к чему-либо новому; она лишь излишне усложняет приведенную аналогию.

Так можно было бы подумать с первого взгляда. Однако уже первая попытка построения полной волновой картины приводит к таким поразительным следствиям, что, наоборот, появляется другое подозрение. *Ведь сейчас*

* См. для оптического случая работу А. Зоммерфельда и И. Рунге (Ann. Physik, 1911, 35, 290), где (соответственно устному замечанию Дебая) показано, как можно из уравнения второго порядка и первой степени для волновой функции («волновое уравнение») строго получить в предельном случае стремящейся к нулю длины волны уравнение первого порядка и второй степени для фазы («уравнение Гамильтона»).

известно, что наша классическая механика неверна при малых размерах и большой кривизне траекторий; не является ли это обстоятельство вполне аналогичным известной неприменимости геометрической оптики, т. е. оптики с «бесконечно малой длиной волны», в случае «препятствий» или «отверстий», сравнимых по размерам с действительной конечной длиной волны? Быть может, наша классическая механика представляет полную аналогию с геометрической оптикой и подобно последней отказывается служить и не согласуется с действительным положением вещей при размерах и радиусе кривизны траекторий, приближающихся по величине к некоторой длине волны, которая теперь принимает в q -пространстве реальный смысл. Тогда целесообразно попытаться построить «волновую механику» * и первым шагом на этом пути является, конечно, волновое истолкование представлений Гамильтона.

§ 2. «Геометрическая» и «волновая» механика

Сделаем прежде всего предположение, что при построении рассматриваемой аналогии нужно считать введенную выше волновую систему синусоидальной волной. Хотя это предположение является простейшим и естественным, однако вследствие его основного значения нужно подчеркнуть некоторую вносимую им произвольность. Таким образом, время может входить в волновую функцию лишь посредством множителя $\sin(\dots)$, аргумент которого также линейно зависит от W . Поскольку функция W является действием, а фаза синуса безразмерна, то коэффициент перед W должен иметь размерность, обратную размерности действия. Мы примем, что этот коэффициент носит универсальный характер, т. е. не зависит не только от E , но и от природы механической системы; обозначим его сразу через $2\pi/h$. Таким образом получаем зависящий от времени множитель в виде

$$\sin\left(\frac{2\pi W}{h} + \text{const}\right) = \sin\left(-\frac{2\pi Et}{h} + \frac{2\pi S(q_k)}{h} + \text{const}\right). \quad (10)$$

Отсюда для частоты ν волны вытекает соотношение

$$\nu = \frac{E}{h}. \quad (11)$$

Таким образом, без введения каких-либо искусственных гипотез получается, что частота волны в q -пространстве пропорциональна энергии системы **. Это утверждение, конечно, имеет смысл только лишь, если энергия E определена не как в классической механике, с точностью до аддитивной постоянной, а абсолютно. От этой аддитивной постоянной не зависит согласно формулам (6) и (11) длина волны

$$\lambda = \frac{u}{\nu} = \frac{h}{\sqrt{2(E - V)}}, \quad (12)$$

* *A. Einstein. Berl. Ber., 1925, S. 9 [3].*

** В первом сообщении из-за использования чисто спекулятивных предположений это равенство получилось лишь приближенно.

поскольку подкоренное выражение является удвоенной кинетической энергией. При предварительном грубом сравнении этой длины волны с размерами траектории электрона в атоме водорода, полученными с помощью классической механики, следует обратить внимание на то, что по формуле (3) «расстояние» в нашем q -пространстве имеет размерность не длины, а длины, умноженной на корень из массы. Такую же размерность имеет λ . Как легко видеть, при подобном сравнении мы должны делить λ на размер траекторий (равный a сантиметрам), умноженный на корень из массы электрона m . Получающееся отношение имеет порядок величины

$$\frac{h}{mva},$$

где v —мгновенная скорость электрона (см/сек). Знаменатель mva имеет здесь порядок величины механического момента количества движения. То, что эта величина в случае кеплеровых траекторий атомных размеров имеет по меньшей мере порядок 10^{-27} , следует без всякой квантовой теории из значений массы и заряда электрона. Таким образом, мы действительно получим для границы приближенной справедливости классической механики правильный порядок величины, если будем идентифицировать нашу постоянную h с планковским квантом действия. Все это имеет смысл лишь предварительной ориентировки.

Если выразить в формуле (6) E согласно (11) через ν , то получается

$$u = \frac{h\nu}{\sqrt{2(h\nu - V)}}. \quad (6')$$

Зависимость волновой скорости от энергии системы переходит, таким образом, в своеобразную зависимость от частоты, т. е. получается закон дисперсии волн. Этот закон представляет черзвычайный интерес. Мы указывали в § 1, что движение волновых поверхностей слабо связано с движением системы точек, поскольку скорости этих движений не равны и не могут быть равны. Однако согласно формулам (9), (11) и (6) скорость движения системы v имеет и для волн очень конкретный смысл. Как легко показать, имеет место равенство

$$v = \frac{d\nu}{d\left(\frac{\nu}{u}\right)}, \quad (13)$$

т. е. скорость движения системы точек равна скорости группы волн, мало отличающихся по частотам (скорости распространения сигнала). Мы вновь получили закон, выведенный де Бройлем в его прекрасном исследовании * для «фазовых волн» электрона в непосредственной связи с теорией относительности. Этому исследованию в значительной мере обязано появление моей работы. Очевидно, в данном случае дело идет об имеющей большую общность теореме, которая не является простым следствием теории относительности,

* *L. de Broglie. Ann. phys. (10), 1925, 3, 22. (Theses, Paris, 1924).*

а верна также и для любой консервативной системы, подчиняющейся обычной механике.

Приведенные обстоятельства позволяют значительно теснее, чем это можно было до сих пор, связать изображение движения точки с распространением волн. Можно попытаться построить волновую группу, имеющую во всех направлениях относительно малые размеры. Подобная волновая группа будет, по-видимому, двигаться по тем же законам, что и отдельная изображающая механическую систему точка. При этом получается, так сказать, суррогат изображающей точки до тех пор, пока протяженность нашей волновой группы пренебрежимо мала по отношению к траектории системы, и ее можно считать точечной. Это будет, во всяком случае, иметь место лишь тогда, когда размеры и в особенности радиус кривизны траектории очень велики по сравнению с длиной волны. Дело в том, что из аналогии с обычной оптикой непосредственно ясно, что протяженность волновой группы не может быть в нашем случае меньше длины волны, а должна, наоборот, составлять во всех измерениях значительное число длин волн для того, чтобы составляющие группы волн могли оставаться приблизительно монохроматическими. Мы вынуждены требовать выполнения этого условия, так как волновая группа в целом должна распространяться с определенной групповой скоростью и соответствовать механической системе с определенной энергией (см. равенство (11)).

По-моему, подобные волновые группы можно построить, причем таким же способом, каким Дебай * и фон Лауэ ** решили задачу обычной оптики о нахождении точного аналитического представления для светового конуса или светового пучка [4]. При этом появляется еще крайне интересная связь с не рассмотренной в § 1 частью теории Якоби—Гамильтона, а именно с известным способом получения интегралов уравнений движения посредством дифференцирования полного интеграла уравнения Гамильтона по постоянным интегрирования. Как мы сейчас увидим, упомянутый только что метод получения интегралов движения Якоби равнозначен в нашем случае следующему положению: изображающая механическую систему точка совпадает длительное время с той точкой, где встречается определенный континуум волн в равной фазе.

Строгое волновое представление «пучка лучей», исходящих из некоторого источника, с «резко» ограниченным конечным поперечным сечением, получается в оптике, по Дебаю, следующим образом: берется суперпозиция континуума плоских волн, каждая из которых заполняет все пространство, при этом нормали к входящим в суперпозицию волновым поверхностям изменяются в пределах заданного угла. Вне определенного двойного конуса волны в результате интерференции почти совершенно уничтожают друг друга, так что с точностью до явлений, связанных с дифракцией, получается волновое представление ограниченного светового пучка. Подобным же образом можно представить и бесконечно узкий лучевой конус, изменяя лишь

* *P. Debye. Ann. Phys., 1909, 30, 755.*

** *M. v. Laue. Ann. Phys., 1914, 44, 1197 (§ 2).*

волновую нормаль совокупности плоских волн внутри бесконечно малого телесного угла.

Этим обстоятельством воспользовался фон Лауэ в своей знаменитой работе о степенях свободы пучков лучей *. Наконец, вместо того, чтобы использовать, как это до сих пор молчаливо предполагалось, только чисто монохроматические волны, можно варьировать частоту внутри некоторого бесконечно малого интервала и посредством соответствующего подбора амплитуд и фаз ограничить возмущение областью, которая будет сравнительно мала также и в продольном направлении. Таким образом может быть получено аналитическое представление «энергетического пакета» сравнительно небольших размеров; этот пакет будет передвигаться со скоростью света или в случае дисперсии с групповой скоростью. При этом мгновенное положение энергетического пакета (если не касаться его структуры) определяется естественным образом как та точка пространства, где все участвующие в суперпозиции плоские волны встречаются в точно одинаковой фазе.

Применим теперь приведенные рассуждения к волнам в q -пространстве. Выберем в q -пространстве для некоторого момента времени определенную точку P , через которую в момент времени t должен пройти в заданном направлении волновой пакет. Пусть также заданы средняя частота ν или среднее значение E для этого пакета. Подобные условия соответствуют заданию в случае механической системы исходной конфигурации и компонентов скорости в начальный момент. (Задание энергии и направления движения равносильно заданию значений компонентов скорости.)

Чтобы произвести оптическое построение, используем прежде всего некоторое семейство волновых поверхностей, соответствующее нужной нам частоте, т. е. возьмем некоторое решение уравнения Гамильтона (1') с определенным значением E ; это решение, которое мы обозначим буквой W , должно обладать также следующим свойством: нормаль к поверхности постоянного уровня, проходящей в момент t через точку P , например к поверхности

$$W = W_0, \quad (14)$$

должна быть направлена к точке P в некотором заданном направлении R . Этого, однако, еще недостаточно. Мы также должны иметь возможность бесконечно мало варьировать волновую поверхность, и притом n способами (n — число степеней свободы в q -пространстве) так, чтобы нормали к этим поверхностям в точке P заполняли $(n-1)$ -мерный бесконечно малый угол и частота E/h изменялась на бесконечно малом одномерном интервале, причем также необходимо, чтобы все плоскости из получившегося бесконечно малого n -мерного континуума в момент t встречались в точке P со строго одинаковой фазой. Затем следует определить, где лежит в какой-нибудь другой момент времени точка, в которой вновь выполняется условие равенства всех фаз сходящихся к ней волн.

Для того чтобы это можно было сделать, достаточно иметь некоторое решение W уравнения Гамильтона, содержащее, кроме константы E , кото-

* См. предыдущее примечание.

рую мы временно будем обозначать α_1 , еще $n-1$ существенно постоянных $\alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \dots, \alpha_n$. Дело в том, что тогда мы сможем, во-первых, придать постоянной α_1 заданное значение E и, во-вторых, будем иметь возможность определить постоянные $\alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_n$ таким образом, чтобы проходящая через точку P поверхность семейства имела в этой точке заданное направление нормали R . Пусть в дальнейшем постоянные $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ имеют как раз такие значения и пусть формула (14) определяет проходящую через точку P в момент t поверхность рассматриваемого семейства. Рассмотрим затем континуум семейств поверхностей, принадлежащих ограниченному бесконечно малому интервалу изменения величин α_k . Один из членов этого континуума, т. е. одно семейство поверхностей, определяется посредством уравнения

$$W + \frac{\partial W}{\partial \alpha_1} d\alpha_1 + \frac{\partial W}{\partial \alpha_2} d\alpha_2 + \dots + \frac{\partial W}{\partial \alpha_n} d\alpha_n = \text{const} \quad (15)$$

при заданных значениях $d\alpha_1, d\alpha_2, \dots, d\alpha_n$ и заданной варьируемой величине const . Та отдельная поверхность из этого семейства, которая во время t проходит через точку P , получится при следующем выборе величины const :

$$W + \frac{\partial W}{\partial \alpha_1} d\alpha_1 + \dots + \frac{\partial W}{\partial \alpha_n} d\alpha_n = W_0 + \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_1}\right)_0 d\alpha_1 + \dots + \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_n}\right)_0 d\alpha_n, \quad (15')$$

где через $\left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_1}\right)_0$ и т. д. обозначены постоянные, которые получаются после подстановки в соответствующие производные координат точки P и времени t (последнее фактически входит, впрочем, лишь в $\frac{\partial W}{\partial \alpha_1}$).

Плоскости (15'), соответствующие всевозможным совокупностям значений $d\alpha_1, d\alpha_2, \dots, d\alpha_n$, образуют в свою очередь некоторое семейство. В момент t все эти плоскости проходят через точку P , их нормали заполняют малый $(n-1)$ -мерный пространственный угол, кроме того, параметр E изменяется у них в некоторой малой области. Это семейство (15') составлено таким образом, что каждая из входящих в него поверхностей является также членом какого-нибудь семейства (15), причем именно тем членом, который в момент t проходит через точку P .

Примем теперь, что фазовые углы волновых функций, принадлежащих семействам (15), совпадают с фазовыми углами, соответствующими поверхностям, входящим одновременно в (15'), т. е. совпадают в момент t в точке P .

Зададим теперь вопрос: найдется ли при любом значении времени такая точка, в которой будут пересекаться все поверхности семейства (15') и в которой вследствие этого все волновые функции, соответствующие семействам (15), будут совпадать по фазе? Ответ будет следующий: такая точка, в которой совпадают фазы, найдется, однако эта точка не будет общей точкой пересечения поверхностей семейства (15'), так как такой точки в каждый момент времени больше не существует. Более того, точки с одинаковой фазой оказываются такими, что с изменением времени те поверхности семейства (15), которые входят одновременно в это семейство, непрерывно меняются.

Это можно установить следующим образом. В общей точке пересечения всех составляющих семейства (15) в некоторый момент времени должны одновременно иметь место равенства

$$W = W_0, \quad \frac{\partial W}{\partial \alpha_1} = \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_1} \right)_0, \quad \frac{\partial W}{\partial \alpha_2} = \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_2} \right)_0, \dots, \frac{\partial W}{\partial \alpha_n} = \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_n} \right)_0, \quad (16)$$

так как величины $d\alpha_i$ внутри некоторой малой области произвольны. В этих $n+1$ равенствах правые части являются постоянными, а левые — функциями $n+1$ величин $q, q_2, \dots, q_n, t$. Равенства (16) удовлетворяются системой начальных значений, т. е. координатами точки P в исходный момент времени t . При любом другом значении t эта система окажется переопределенной.

Можно, однако, поступить следующим образом. Откинув сначала первое равенство $W = W_0$, определим с помощью n остальных равенств координаты q_k как функции времени и постоянных. Точку с этими координатами обозначим Q . В ней первое равенство, очевидно, не будет выполнено, наоборот, левая часть этого равенства будет отличаться от правой на некоторую величину. Если вспомнить происхождение соотношений (16) из условия (15'), то из сказанного становится очевидным, что Q представляет собой общую точку не системы поверхностей (15'), а некоторой другой системы, получающейся после изменения правой части (15') на одну и ту же для всех поверхностей величину. Обозначим полученную таким образом систему поверхностей (15''). Для нее точка Q будет общей точкой. Как это было ранее отмечено, в (15'') войдут из семейства (15) уже не те поверхности, которые входили в (15'). Эта замена поверхностей в (15') происходит вследствие изменения постоянной в равенстве (15) на одинаковую величину для всех составляющих. Таким образом, фаза у всех составляющих также изменяется на одну и ту же величину. Поэтому члены нового семейства, которое мы обозначили (15''), будут, пересекаясь в точке Q , так же как и члены семейства (15'), совпадать по фазе. Это означает также, что точка Q , определенная с помощью n уравнений

$$\frac{\partial W}{\partial \alpha_1} = \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_1} \right)_0, \dots, \frac{\partial W}{\partial \alpha_n} = \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_n} \right)_0 \quad (17)$$

как функция времени, будет всегда оставаться точкой одинаковой фазы всего семейства волновых поверхностей (15).

Из n поверхностей, пересечение которых определяет согласно (17) точку Q , все, кроме первой, закреплены (только первое из равенств (17) содержит время). Линия пересечения $n-1$ закрепленных поверхностей определяет траекторию точки Q . Как нетрудно показать, эта линия пересечения является ортогональной траекторией семейства поверхностей $W = \text{const}$. Функция W , по исходному предположению, удовлетворяет уравнению Гамильтона (1') тождественно по $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$. Если продифференцировать теперь уравнение Гамильтона по α_k ($k=2, 3, \dots, n$), то станет видно, что нормаль к поверхности $\frac{\partial W}{\partial \alpha_k} = \text{const}$ перпендикулярна в каждой точке поверхности к нормали, проходящей через ту же точку поверхности

$W = \text{const}$, т. е. каждая из этих двух поверхностей содержит нормаль к другой поверхности. Если линия пересечения $n-1$ неподвижных поверхностей (17) не разветвляется, что наверняка имеет место в общем случае, то каждый линейный элемент этой линии должен совпадать как единственный общий элемент всех $n-1$ поверхностей с нормалью к проходящей через данную точку W -поверхности, т. е. эта линия пересечения действительно будет ортогональной траекторией семейства наших W -поверхностей, что и требовалось доказать.

Довольно длинные рассуждения, приведшие нас к равенствам (17), могут быть высказаны кратко, так сказать, стенографически, следующим образом: с точностью до универсальной константы $1/h$ функция W означает фазу волновой функции. Если теперь имеется не одна, а целое непрерывное многообразие волновых систем, соответствующих различным непрерывно изменяющимся значениям параметра α , то уравнения $\frac{\partial W}{\partial \alpha} = \text{const}$ являются выражением того, что все бесконечно мало отличающиеся члены этого многообразия (волновые системы) имеют совпадающие значения фазы. Эти уравнения определяют, таким образом, геометрическое место точек одинаковой фазы. Если число уравнений достаточно велико, то это геометрическое место сжимается в точку; положение этой точки одинаковой фазы определяется уравнениями как функция времени.

Поскольку система (17) совпадает с известной второй системой равенств Якоби, то мы показали, таким образом, что *точка совпадающих фаз некоторого n -параметрического инфинитезимального многообразия волновых систем движется по тем же законам, что и точка, изображающая механическую систему.*

Я считаю, далее, даже при специальном выборе амплитуд и формы волновых поверхностей, очень сложной задачей строгое доказательство того, что суперпозиция этих волновых систем приводит к наличию заметного возмущения лишь в сравнительно малой окрестности точки совпадающих фаз, в то время как во всех остальных точках интерференция приводит к отсутствию заметных возмущений. Я лишь выставлю соответствующую физическую гипотезу, не занимаясь только что поставленной задачей, которую имеет смысл решать лишь после того, как эта гипотеза будет оправдана; ее применения потребуют тщательного анализа.

Наоборот, можно быть совершенно уверенным в том, что линейные размеры области, в которой заключено возмущение, составляют во всех направлениях еще значительное число длин волн. Это очевидно, во-первых, потому, что при удалении от точки совпадающих фаз на расстояние, равное небольшому числу длин волн, совпадение фаз почти не нарушится и условия интерференции почти не изменятся. Во-вторых, достаточно учесть, что данное условие выполняется в трехмерном евклидовом случае обычной оптики, чтобы убедиться в том, что это имеет место в общем случае.

Я теперь с большой уверенностью утверждаю следующее: действительное механическое явление следует понимать или изображать как волновой процесс в q -пространстве, а не как движение изображающей точки в этом про-

странстве. Рассмотрение движения изображающей точки, составляющее предмет классической механики, является лишь приближенным способом изучения поведения системы и может быть оправдано лишь подобно тому, как в некоторых случаях оправдывается применение лучевой или геометрической оптики для изучения действительных волновых оптических процессов. Макроскопический механический процесс должен изображаться как волновой сигнал описанного выше вида, который с достаточным приближением может считаться точечным в сравнении с геометрической структурой траектории. Как мы видели, для подобного сигнала или группы волн действительно выполняются точно те же законы движения, что и устанавливаемые классической механикой законы движения изображающей систему точки. Подобный способ рассмотрения теряет, однако, всякий смысл, если размеры траектории не очень велики по сравнению с длиной волны или даже сравнимы с ней. В этом случае следует перейти к строгому волновому рассмотрению, т. е. следует изображать многообразие возможных процессов, исходя из волнового уравнения, а не из основных уравнений механики, которые для объяснения сущности микроструктуры механического движения столь же непригодны, как и геометрическая оптика для объяснения явлений дифракции.

Поскольку все же известное истолкование этой микроструктуры, конечно, при дополнительных весьма искусственных предположениях может быть получено с помощью классической механики (причем имеются значительные практические достижения), то мне кажется особенно знаменательным, что подобное истолкование (я имею в виду квантовую теорию в форме, предложенной Зоммерфельдом, Шварцшильдом, Эпштейном и некоторыми другими) находится в теснейшей связи с уравнением Гамильтона и теорией Гамильтона—Якоби, т. е. с той формой классической механики, которая уже содержит отчетливое указание на истинный волновой характер движения. Уравнение Гамильтона соответствует как раз принципу Гюйгенса (в его старой наивной, а не в строгой, приданной ему Кирхгофом форме). И подобно тому, как последний принцип, дополненный совершенно непонятными с точки зрения геометрической оптики правилами (правило зон Френеля), уже в значительной мере разъясняет явления дифракции, можно в некоторой мере уяснить, исходя из теории функции действия, происходящие в атоме процессы. Напротив, можно запутаться в неразрешимых противоречиях, если пытаться, как это кажется естественным, полностью удерживать и для атомных процессов понятие траектории системы; подобно этому бессмысленно, как известно, подробно изучать в области дифракционных явлений движение светового луча.

Представим себе следующее. Я при этом не собираюсь еще давать изображение действительного положения вещей, которое полностью не может быть получено из имеющихся исходных положений без исследования самого волнового уравнения; я предполагаю предложить лишь чисто качественную иллюстрацию. Итак, представим себе группу волн с описанными выше свойствами, движущуюся по какому-либо малому и, например, замкнутому «пути», размеры которого сравнимы с длиной волны и, тем самым, меньше

размеров рассматриваемой группы волн. Очевидно, «путь системы», в смысле классической механики являющийся траекторией точки совпадающих фаз, не будет при этом как-либо выделен, поскольку вокруг такой точки имеется еще целый континуум точек, в которых также имеет место почти полное совпадение фаз и которые описывают совершенно другие «пути». Иначе говоря: волновая группа заполняет сразу не только всю траекторию, но и достаточно большую часть соседнего с этой траекторией пространства.

В этом смысле я истолковываю «фазовые волны», сопровождающие, согласно де Бройлю, движущийся электрон; в этом же смысле не имеет какого-либо особого значения, во всяком случае в атоме, траектория электрона и тем более его положение на этой траектории. Таким же образом я истолковываю получающее все большее и большее признание утверждение о том, что, во-первых, фаза движущегося в атоме электрона не имеет реального смысла; что, во-вторых, никогда нельзя приписывать электрону в некоторый определенный момент времени положения на определенной, выделенной квантовыми условиями квантовой траектории; что, в-третьих, истинные законы квантовой механики состоят не в предписывании правил для отдельных траекторий, а что эти законы связывают в действительности с помощью уравнений все многообразие траекторий некоторой системы, так что, очевидно, между различными траекториями существует известное взаимодействие *.

Понятно, что тщательный анализ экспериментов должен подтвердить эти утверждения, если только на экспериментальные данные действительно влияет, как мы это считаем, указанная структура движения. Из приведенных нами утверждений следует невозможность последовательного истолкования понятий: «положение электрона» и «траектория электрона»; если все же попытаться сохранить эти понятия, то они неизбежно окажутся противоречивыми. Это противоречие настолько резко, что возникает сомнение, может ли вообще быть понята сущность движения в атоме с помощью пространственно-временной формы мышления. С философской точки зрения, я считаю решение вопроса в таком духе равносильным полному поражению, так как мы в действительности не можем изменить своих методов мышления и все, что не познаваемо с помощью этих методов, не может быть понято вообще. Аналогичные случаи, возможно, существуют, но я не верю в то, что к ним относится и проблема структуры атома. С нашей точки зрения, нет никаких оснований для подобных сомнений, хотя, или, лучше сказать, потому, что их причина вполне понятна. Подобным образом мог бы так же потерпеть крушение сторонник геометрической оптики, подходя в своих опытах к явлениям дифракции и используя понятие луча, оправданное макроскопической оптикой; этот оптик мог бы в конце концов тоже прийти к мысли, что законы геометрии неприменимы к явлениям дифракции, поскольку считаемые им прямыми и независимыми друг от друга световые лучи при этих явлениях каждый раз замечательным образом закручиваются в однородной среде и заметно влияют

* Ср. в особенности цитируемые в дальнейшем работы Гейзенберга, Борна, Иордана, Дирака, а также статью Н. Бора (Die Naturwissenschaften, Januar 1926) [5].

друг на друга. Я считаю, что здесь имеет место очень тесная аналогия. Даже для необъяснимых закручиваний в атоме эта аналогия сохраняет силу — вспомним о «внемеханическом принуждении», придуманном для объяснения аномального эффекта Зеемана [6].

Как действовать при волновом построении механики в тех случаях, когда резко проявляется волновой характер процессов? Следует исходить не из основных уравнений механики, а из волнового уравнения в q -пространстве и затем рассматривать многообразие определяемых этим уравнением процессов. В этом сообщении волновое уравнение не было до сих пор явно использовано, даже его вид еще не установлен. Некоторые данные для установления волнового уравнения дает содержащаяся в формулах (6) и (6') зависимость волновой скорости от параметра механической энергии или частоты, но, очевидно, что только с помощью этих данных нельзя однозначно установить вид волнового уравнения. Для простоты будем сначала считать, хотя это вообще не очевидно, что наше уравнение второго порядка. Полагаем затем, что для волновой функции ψ имеет место уравнение

$$\operatorname{div} \operatorname{grad} \psi - \frac{1}{u^2} \ddot{\psi} = 0, \quad (18)$$

выполняющееся для процессов, зависимость которых от времени определяется множителем $e^{2\pi i \nu t}$. Это означает также, что вследствие формул (6), (6') и (11) имеет место уравнение

$$\operatorname{div} \operatorname{grad} \psi + \frac{8\pi^2}{h^2} (h\nu - U) \psi = 0 \quad (18')$$

или

$$\operatorname{div} \operatorname{grad} \psi + \frac{8\pi^2}{h^2} (E - U) \psi = 0. \quad (18'')$$

Дифференциальные операции следует здесь, разумеется, понимать в связи с определением линейного элемента (3). Однако даже при предположении, что должен иметь место второй порядок, приведенное уравнение не является единственным совместным с формулой (6); возможны обобщения, в которых $\operatorname{div} \operatorname{grad} \psi$ заменяется выражением

$$f(q_k) \operatorname{div} \left(\frac{1}{f(q_k)} \operatorname{grad} \psi \right), \quad (19)$$

где f может быть любой функцией q_k , зависящей также приемлемым образом от E , от $V(q_k)$ и от коэффициентов линейного элемента (3) (можно, например, представить себе, что $f=u$). Мы снова здесь руководствовались только стремлением к простоте; при этом не исключено, что были сделаны ошибочные выводы*.

Переход к использованию дифференциального уравнения в частных производных вместо основных уравнений динамики в случае атомных задач

* Введение функции $f(q_k)$ обозначает, что от точки к точке изменяются не только «плотность», но и «упругость».

кажется сначала чрезвычайно неприятным из-за огромного количества решений, которыми обладает это уравнение. Уже классическая механика приводила не к одному решению уравнений, а к целому обширному множеству решений, составляющему непрерывное семейство, в то время как согласно опыту в действительности может реализоваться лишь прерывное множество этих решений. Задача квантовой теории по господствующему сейчас мнению заключается как раз в том, чтобы с помощью некоторых «квантовых условий» выделить из непрерывного семейства решений классической механики дискретное семейство траекторий, соответствующих действительно возможным движениям. Кажется бесполезным искать выход из создавшегося положения в указанном нами направлении, поскольку сначала при подобном подходе мощность множества решений не только не уменьшается, но даже увеличивается.

Однако и задачи классической динамики могут быть сведены к дифференциальному уравнению в частных производных, а именно к уравнению Гамильтона. При этом множество решений подобной задачи вовсе не соответствует множеству решений у. Г. Любой «полный» интеграл у. Г. уже полностью решает механическую проблему, каждый другой полный интеграл приводит к тем же траекториям, множество которых лишь по-иному составлено.

Что касается опасений, возникающих в связи с выбором уравнения (18) в качестве основания атомной механики, то я нигде не утверждал, что к этому уравнению не должны быть добавлены еще и другие дополнительные положения. Однако эти дополнительные условия будут, по-видимому, не столь неожиданными и непонятными, как современные «квантовые правила»; даже наоборот, их вид типичен для физических задач с уравнениями в частных производных (имеются в виду начальные и граничные условия). Эти условия не будут ни в какой мере аналогичны квантовым правилам, так как квантовые условия во всех случаях классической динамики, которые я до сих пор исследовал, заключаются в самом уравнении (18). Данное уравнение само выделяет в известных случаях, причем как раз тогда, когда это также следует из опыта, некоторые определенные частоты или уровни энергии, как единственно возможные при стационарных процессах; при этом не предъявляется никаких дополнительных требований, кроме физически почти очевидного условия, что функция ϕ должна быть в конфигурационном пространстве однозначной, ограниченной и непрерывной.

Высказанное опасение, таким образом, не оправдывается, по крайней мере, в случае уровней энергии или, осторожней говоря, в случае частот (так как нельзя забывать, что остается неясным, как следует истолковывать «энергию колебаний», поскольку лишь в случае одного тела можно говорить о чем-то, что поддается истолкованию как колебания в действительном трехмерном пространстве). Определение квантовых уровней не разбивается больше на два, по существу различных, этапа, а именно: 1) на нахождение всех динамически возможных траекторий и 2) на отбрасывание большинства полученных на первом этапе решений с выделением некоторых немногих, удовлетворяющих специальным требованиям; напротив, квантовые уровни

определяются теперь сразу как собственные значения уравнения (18), при которых выполняются введенные выше естественные граничные условия.

Пока я с достоверностью не могу судить о том, получится ли подобным же образом аналитическое объяснение и более сложных случаев. Я могу это только предполагать. Большинству исследователей, конечно, кажется, что при описанном выше дележестве на этапы методе первый этап дает решение более сложной проблемы, чем это собственно требуется для получения окончательного результата: получения выражения для энергии, имеющего обычно вид очень простой рациональной функции от квантовых чисел. Уже применение метода Гамильтона—Якоби приводит, как известно, к большим упрощениям, причем отпадает необходимость в фактическом решении механических уравнений. Вместо того чтобы брать представляющие импульсы интегралы с переменным верхним пределом, достаточно их интегрировать по замкнутому в комплексной плоскости пути, что представляет значительно меньше труда. Кроме того, если действительно известен полный интеграл уравнения Гамильтона, т. е. если он выражен в виде квадратур, то в принципе может быть получено решение механической задачи при любых начальных условиях. При нахождении собственных значений дифференциального уравнения обычно, особенно в конкретных задачах, получают решение сначала без учета граничных условий и условий устойчивости и лишь затем, исходя из явного вида решения, выбирают значения параметров, при которых названные условия должны выполняться.

Примером подобного подхода может служить наше первое сообщение. На указанном примере видно также, что, как это характерно вообще для задач о собственных значениях, решение, имеющее в общем случае крайне громоздкий аналитический вид (формула (12) цитируемой работы), значительно упрощается для собственных значений, соответствующих «естественным граничным условиям». Я недостаточно знаком с тем, разработаны ли уже сейчас прямые методы вычисления собственных значений, подобно тому, как это сделано для выяснения распределения собственных значений большого номера. Последний предельный случай не представляет здесь прямого интереса, поскольку он соответствует классической, макроскопической механике. Для спектроскопии и атомной физики нужны как раз первые 5 или 10 собственных значений, даже нахождение лишь одного, первого из них, было бы большим достижением, поскольку тем самым был бы определен потенциал ионизации. Сведение проблемы собственных значений к задаче на экстремум без непосредственного использования дифференциального уравнения приводит к отчетливому изложению, и, по-моему, вероятно, что будут найдены по крайней мере приближенные методы, основанные на подобном сведении, поскольку в них имеется настоятельная необходимость. По меньшей мере, в отдельных случаях должно быть возможным исследование того, удовлетворяют ли задаче те собственные значения, численные величины которых получены с большой точностью спектроскопически.

Я не могу здесь обойти молчанием то обстоятельство, что сейчас делаются попытки устранения трудностей квантовой теории со стороны Гей-

зенберга, Борна, Иордана и некоторых других выдающихся ученых *, причем благодаря значительности достигнутых успехов нельзя сомневаться в том, что полученные результаты содержат по крайней мере известную долю истины. Как мы уже отмечали, особенно близок по тенденции к данной работе метод Гейзенберга. Однако по применяемым методам предлагаемая попытка решения проблемы настолько отлична от подхода Гейзенберга, что мне пока не удалось найти звено, связующее эти два способа. Я совершенно уверен в том, что обе эти попытки не только не будут противоречить друг другу, но даже, наоборот, вследствие полного различия исходных положений и методов окажутся взаимно дополняющими. Сила гейзенберговской программы заключается в том, что она обещает вычислить интенсивности линий, в то время как мы к этому вопросу пока совершенно не подходили. Сила же предложенного в данной работе метода заключается, насколько я могу судить, в использовании руководящего физического представления, согласно которому микроскопические и макроскопические явления связаны друг с другом, причем разъясняется, почему при истолковании каждого случая требуются внешне различные приемы. Мне лично особенно нравится приведенное в конце предыдущей статьи истолкование излучаемых частот как «биений», причем я думаю, что таким образом будет получено также наглядное истолкование формул для интенсивности [7].

§ 3. Примеры

Мы собираемся здесь добавить к рассмотренной в предыдущем сообщении кеплеровой задаче несколько других примеров. При этом взяты лишь простейшие случаи, поскольку мы пока ограничиваемся классической механикой и не вводим магнитного поля **.

1. Планковский осциллятор. Вопросы вырождения. Рассмотрим прежде всего одномерный осциллятор. Пусть координата будет отклонением, умноженным на квадратный корень из массы. Тогда оба выражения кинетической энергии будут иметь вид

$$T = \frac{1}{2} \dot{q}^2, \quad T = \frac{1}{2} p^2. \quad (20)$$

Потенциальная энергия будет равна

$$V(q) = 2\pi^2 \nu_0^2 q^2, \quad (21)$$

* *W. Heisenberg. Z. Phys., 1925, 33, 879; M. Born, P. Jordan. Ibid., 1925, 34, 858; M. Born, W. Heisenberg, P. Jordan. Ibid., 1926, 35, 557; P. Dirac. Proc. Roy. Soc. London, 1925, 109, 642.*

** В релятивистской механике, а также при учете магнитного поля у. Г. становится сложнее. В случае отдельного электрона согласно у. Г. разность четырехмерного градиента функции действия и некоторого заданного вектора (четырёхмерного потенциала) равна постоянной величине. Волновое истолкование этого положения довольно затруднительно.

где ν_0 — собственная частота в механическом смысле. Уравнение (18) в этом случае примет форму

$$\frac{d^2\psi}{dq^2} + \frac{8\pi^2}{h^2} (E - 2\pi^2\nu_0^2 q^2) \psi = 0. \quad (22)$$

Положим для сокращения

$$a = \frac{8\pi^2}{h^2} E, \quad b = \frac{16\pi^2\nu_0^2}{h^2}, \quad (23)$$

тогда вместо уравнения (22) получится

$$\frac{d^2\psi}{dq^2} + (a - bq^2) \psi = 0. \quad (22')$$

Введем в качестве независимой переменной величину

$$x = q\sqrt[4]{b}, \quad (24)$$

после чего получаем

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{a}{\sqrt{b}} - x^2\right) \psi = 0. \quad (22'')$$

Собственные значения и собственные функции этого уравнения известны *. Собственные значения в используемых обозначениях равны

$$\frac{a}{\sqrt{b}} = 1, 3, 5, \dots, (2n+1), \dots \quad (25)$$

Собственными функциями являются ортогональные функции Эрмита

$$e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x), \quad (26)$$

причем n -й полином Эрмита $H_n(x)$ может быть определен как

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n e^{-x^2}}{dx^n} \quad (27)$$

или в явном виде как

$$H_n(x) = (2x)^n - \frac{n(n-1)}{1!} (2x)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} (2x)^{n-4} - \dots \quad (27')$$

Первые из этих полиномов равны

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1, & H_1(x) &= 2x, & H_2(x) &= 4x^2 - 2, \\ H_3(x) &= 8x^3 - 12x, & H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12, \dots \end{aligned} \quad (27'')$$

* Ср.: R. Courant, D. Hilbert. Methoden der mathematischen Physik. 1924, Kap. 5, § 9, S. 261, уравнение 43 и далее: Kap. 2, § 10, 4, S. 76.

Рассматривая сначала собственные значения, согласно равенствам (25) и (23) получаем

$$E_n = \frac{2n+1}{2} h\nu_0, \quad n=0, 1, 2, \dots \quad (25')$$

В качестве квантовых уровней получаются, таким образом, так называемые «полуцелые» кратные «энергетического кванта», характерного для осциллятора, т. е. нечетные кратные величины $h\nu_0/2$. Расстояния между уровнями, определяющие излучение, получаются такими же, что и в существующей теории. Замечательным образом наши квантовые уровни точно равны уровням, полученным по теории Гейзенберга! Для теории теплоемкости полученное отличие от существующих теорий имеет известное значение, в особенности тогда, когда из-за теплового расширения изменяется собственная частота ν_0 . Формально при этом речь идет о старом вопросе нулевой энергии, вставшем уже ранее в связи с дилеммой: какое из толкований планковской теории, первое или второе, считать правильным. Дополнительный член $h\nu_0/2$ изменяет также закон границ спектральных полос.

Вид собственных функций (26), если вновь ввести переменную q , будет следующий:

$$\psi_n(q) = e^{-\frac{2\pi^2\nu_0 q^2}{h}} H_n\left(2\pi q \sqrt{\frac{\nu_0}{h}}\right). \quad (26')$$

Рассмотрение формулы (27'') показывает, что первая собственная функция представляет собой гауссовский «закон распределения вероятностей», вторая собственная функция в начале координат обращается в нуль и совпадает при положительных x с двумерным максвелловским законом распределения по скорости, который продолжается в сторону отрицательных x нечетным образом. Третья собственная функция вновь является четной, кроме того, она отрицательна в начале координат и имеет два симметричных нуля в точках $\pm \frac{1}{\sqrt{2}}$ и т. д. Качественное поведение остальных функций легко

поддается рассмотрению. При этом следует заметить, что корни каждого последующего полинома разделяют корни предыдущего. Из формулы (26) следует, что характеристические точки собственных функций, как, например, полуширина (для $n=0$), нули, максимумы, лежат преимущественно в области, доступной и для классического осциллятора, поскольку, как легко получить, классическая амплитуда n -го колебания равна

$$q_n = \frac{\sqrt{E_n}}{2\pi\nu_0} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{h}{\nu_0}} \cdot \sqrt{\frac{2n+1}{2}}. \quad (28)$$

Однако точное значение абсциссы классической точки поворота не соответствует какой-либо особенности в поведении собственной функции, как это можно было бы предположить, так как точки поворота имеют для фазовых

волн тот смысл, что в них квадрат скорости распространения становится бесконечным, а при еще большем расстоянии — отрицательным. В дифференциальном уравнении (22) классической точке поворота соответствует лишь обращение в нуль коэффициента при ψ , что не приводит к появлению какой-либо сингулярности.

Я должен здесь отметить, что подобное обращение в нуль коэффициента при ψ и появление мнимых значений скорости распространения имеют место и в общем случае, а не только для осциллятора. Это как раз аналитическая причина того, что посредством задания одного условия ограниченности искомой функции выделяются точные собственные значения. Рассмотрим вопрос подробнее. Волновое уравнение с действительной скоростью распространения, как известно, означает следующее: чем меньше значение функции в какой-либо точке среднего значения в окрестности этой точки, тем быстрее возрастает значение функции, и наоборот. Тем самым в данном случае, аналогично более наглядному результату для уравнения теплопроводности, с течением времени происходит сглаживание и невозможен неограниченный рост функции. Волновое уравнение с мнимой скоростью распространения означает как раз обратное: значения функции, большие, чем ее среднее значение в окрестности рассматриваемой точки, ускоренно возрастают (а убывают замедленно). Таким образом, ясно, что удовлетворяющая этому уравнению функция легко может оказаться неограниченно возрастающей. Чтобы избежать подобного роста, приходится использовать значительные ограничения, что уже приводит к точным собственным значениям. В самом деле, уже на рассмотренном в первом сообщении примере видно, что требование существования точных собственных значений становится сразу невыполнимым, если только выбрать там величину E положительной, благодаря чему становится действительной во всем пространстве волновая скорость распространения.

Вернемся после этого отступления к осциллятору и выясним вопрос, что изменится, если у нашего осциллятора будет не одна, а две или более степени свободы (пространственный осциллятор, твердое тело). Если каждой координате соответствуют различные механические собственные частоты (значения ν_0), то все останется по-прежнему. При этом достаточно представить ψ в виде произведения функций от каждой из координат, чтобы вся проблема распалась на столько же задач рассмотренного типа, сколько имеется координат. Собственные функции будут произведением ортогональных функций Эрмита, собственные значения всей задачи будут суммами собственных значений, полученных для каждого измерения, во всех возможных сочетаниях. Ни одно собственное значение (всей системы) не будет кратным, если считать, что никакие из значений ν_0 не находятся в рациональном отношении.

Если же, наоборот, последнее имеет место, то указанный метод рассмотрения, хотя и останется возможным, но уже, наверное, не будет единственным. Появятся кратные собственные значения, и рассмотренное выше «разделение» может быть также произведено и в других системах координат, например в случае однородного трехмерного осциллятора в пространственных полях

ных координатах *. Получающиеся собственные значения будут, однако, в каждом случае точно одними и теми же уже потому, что имеется доказательство «полноты» каждой из этих систем собственных функций. Нетрудно увидеть при этом полную аналогию с известными соотношениями, которые в существующей квантовой теории встречаются в случае вырождения. Лишь в одном пункте имеется формальное различие, не являющееся, однако, неприятным. Если применить квантовые условия Зоммерфельда—Эпштейна, пренебрегая возможным вырождением, то хотя и получаются такие же энергетические уровни, тем не менее допустимые траектории оказываются различными, в зависимости от различного выбора системы координат. В нашем случае это не имеет места. Правда, мы приходим к совершенно различным системам собственных функций, если, например, решать задачу о колебаниях, соответствующую невозмущенной кеплеровой проблеме, не в полярных координатах, как это делалось в первом сообщении, а в параболических. Но возможным колебательным состоянием следует считать не отдельное собственное колебание, а их любую конечную или бесконечную линейную комбинацию. Таким образом, всегда можно линейно выразить полученные одним способом собственные функции через другую систему собственных функций, если только последняя является полной.

Нельзя, конечно, совершенно обойти молчанием не упоминавшийся до сих пор вопрос о том, как в действительности распределяется энергия по собственным колебаниям в каком-либо из конкретных случаев. В соответствии с существующей квантовой теорией следует склониться к тому предположению, что определенное заданное значение энергии в вырожденном случае, в отличие от случая отсутствия вырождения, должно иметь лишь совокупность собственных колебаний, принадлежащих некоторому собственному значению, а не каждое колебание в отдельности. Я этот вопрос должен пока оставить совершенно открытым; в частности, остается нерешенным, являются ли вообще найденные «энергетические уровни» в действительности последовательными значениями энергии колебательного процесса или они имеют лишь смысл частот. Для установления точных частот излучения, если принять теорию биений, вообще более не обязательно истолковывать собственные значения как уровни энергии.

2. Ротатор с закрепленной осью. Из-за отсутствия потенциальной энергии в случае евклидова линейного элемента этот пример является простейшим, мыслимым в волновой теории. Пусть A — момент инерции и φ — угол

* При этом зависимость от радиуса r будет определяться уравнением, которое следует рассматривать с помощью метода, совершенно подобного примененному в первом сообщении для исследования кеплеровой задачи. Одномерный осциллятор, между прочим, также приводит к тому же уравнению, если только за независимую переменную принять φ^2 . Именно таким образом я и решил сначала данную задачу. Указание, что в этом случае дело идет об уравнении полиномов Эрмита, я получил от Е. Fues'a. Как я впоследствии узнал, получающиеся при решении кеплеровой задачи полиномы (уравнение (18) первого сообщения) являются $(2n+1)$ -ми производными от $(n+l)$ -х полиномов Лагерра [8].

вращения, тогда волновое уравнение, очевидно, принимает вид

$$\frac{1}{A} \frac{d^2 \psi}{d\varphi^2} + \frac{8\pi^2 E}{h^2} \psi = 0. \quad (29)$$

Оно имеет решение:

$$\psi = \frac{\sin}{\cos} \left[\sqrt{\frac{8\pi^2 E A}{h^2}} \varphi \right]. \quad (30)$$

Аргумент должен быть здесь целым кратным φ уже по той простой причине, что функция ψ иначе не будет в области изменения аргумента ни однозначной, ни непрерывной, поскольку значение $\varphi + 2\pi$ эквивалентно значению φ . Это условие приводит к известному результату

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8\pi^2 A} \quad (31)$$

в полном соответствии с существующей теорией.

Данный результат не может быть, однако, использован для исследования спектральных полос, так как ниже выяснится то своеобразное обстоятельство, что теория ротатора со свободной осью приводит к совершенно другим выводам. Подобное положение имеет место в общем случае. При применении волновой механики нельзя считать для упрощения вычислений число степеней свободы меньшим даже тогда, когда из интегралов механических уравнений следует, что при некоторых движениях системы определенные степени свободы не проявляются. В микромеханике система основных механических уравнений становится совершенно непригодной, и определяемые этой системой траектории самостоятельно не существуют. Волновой процесс заполняет все фазовое пространство. Известно, что для волнового процесса существенно даже число измерений, в которых он протекает.

3. Твердый ротатор со свободной осью. Если ввести в качестве координат полярные углы ϑ и φ осевой линии, то кинетическая энергия как функция импульсов примет вид

$$T = \frac{1}{2A} \left(p_\vartheta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2 \vartheta} \right). \quad (32)$$

По форме выражение (32) аналогично кинетической энергии материальной точки, движущейся по сфере. Входящий в (18) дифференциальный оператор будет поэтому совпадать с зависящей от полярных углов частью пространственного оператора Лапласа, так что уравнение (18'') примет вид

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \frac{8\pi^2 E}{h^2} \psi = 0. \quad (33)$$

Требование однозначности и непрерывности ψ на сфере приводит, как известно, к собственным значениям

$$\frac{8\pi^2 A}{h^2} E = n(n+1) \quad (n=0, 1, 2, 3, \dots). \quad (34)$$

Собственными функциями будут, очевидно, сферические функции. Энергетические уровни имеют вид

$$E_n = \frac{n(n+1)h^2}{8\pi^2 A} \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots). \quad (34')$$

Это выражение отличается от всех предыдущих (кроме, быть может, гейзенберговского). Экспериментальные данные говорят, однако, в пользу того, что в формулу (31) по различным основаниям нужно подставлять «полуцелые» значения n . Очевидно, что (34) приводит практически к тем же результатам, что и выражение (31) при полуцелых n , так как

$$n(n+1) = \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 - \frac{1}{4}.$$

Разница заключается, таким образом, лишь в малой аддитивной постоянной; расстояния между уровнями в случае формулы (34) остаются такими же, как и при «полуцелом квантовании». Этот результат сохраняет также силу и для коротковолновой области, в которой момент инерции в начальном и конечном состояниях различается из-за «электронных скачков», так как при этом самое большее ко всем линиям из одной серии добавляется лишь малое постоянное слагаемое, незаметное в больших «электронных термах» или в термах, связанных с колебаниями ядер. Отметим, что из проведенного до сих пор анализа с определенностью не следует возможность учитывать это малое дополнительное слагаемое с помощью выражения

$$\frac{1}{4} \frac{h^2}{8\pi^2} \left(\frac{1}{A} - \frac{1}{A'} \right).$$

Представление о моменте инерции, определяемом с помощью «квантовых условий» для движения электронов и колебаний ядер, выходит из рассматриваемого круга идей. В следующем примере мы покажем, что приближенно можно одновременные колебания ядер и вращение в двухатомных молекулах рассматривать как некоторый синтез разобранных в примерах 1 и 3 случаев *. Можно еще упомянуть, что значению $n=0$ соответствует равенство функции ψ не нулю, а некоторой постоянной величине, т. е. при этом получается некоторое колебание с постоянной амплитудой на всей поверхности сферы.

4. Упругий ротатор (двухатомная молекула). Согласно сделанному в конце п. 2 замечанию мы должны здесь с самого начала считать, что имеется шесть степеней свободы, как это имеет место на самом деле. Возьмем сначала декартовы координаты $x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2$ обеих молекул, массы которых положим равными m_1 и m_2 . Пусть r будет расстоянием между ними, а V — потенциальной энергией, равной

$$V = 2\pi^2 \nu_0^2 \mu (r - r_0)^2, \quad (35)$$

* Ср.: *A. Sommerfeld. Atombau und Spektrallinien. 4. Aufl., S. 833.* Мы пока не рассматриваем ангармонический дополнительный член в потенциальной энергии.

где

$$r = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}.$$

Здесь

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (36)$$

является «приведенной массой», ν_0 — механической собственной частотой колебания ядер вдоль соединяющей их оси, а r_0 представляет собой расстояние, при котором потенциальная энергия принимает минимальное значение. При этом все пока рассматривается в смысле обычной механики.

Колебательное уравнение (18'') принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{1}{m_1} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_1^2} \right) + \frac{1}{m_2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_2^2} \right) + \\ + \frac{8\pi^2}{h^2} [E - 2\pi^2 \nu_0^2 \mu (r - r_0)^2] \psi = 0. \end{aligned} \quad (37)$$

Введем в качестве новых независимых переменных величины $x, y, z, \xi, \eta, \zeta$:

$$\begin{aligned} x &= x_1 - x_2, & (m_1 + m_2) \xi &= m_1 x_1 + m_2 x_2, \\ y &= y_1 - y_2, & (m_1 + m_2) \eta &= m_1 y_1 + m_2 y_2, \\ z &= z_1 - z_2, & (m_1 + m_2) \zeta &= m_1 z_1 + m_2 z_2. \end{aligned} \quad (38)$$

После их подстановки получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{m_1 + m_2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \zeta^2} \right) + \\ + [a'' - b' (r - r_0)^2] \psi = 0, \end{aligned} \quad (37')$$

где для сокращения положено

$$a'' = \frac{3\pi^2 E}{h^2}, \quad b' = \frac{16\pi^4 \nu_0^2 \mu}{h^2}. \quad (39)$$

Мы теперь можем представить функцию ψ в виде произведения функции, зависящей от относительных координат x, y, z , на функцию, зависящую от координат центра тяжести ξ, η, ζ :

$$\psi = f(x, y, z) g(\xi, \eta, \zeta). \quad (40)$$

Для определения функции g получается уравнение

$$\frac{1}{m_1 + m_2} \left(\frac{\partial^2 g}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial \zeta^2} \right) + \text{const} \cdot g = 0, \quad (41)$$

имеющее тот же вид, что и уравнение свободного движения материальной точки с массой $m_1 + m_2$. Константа имеет в этом случае следующий смысл:

$$\text{const} = \frac{8\pi^2 E_t}{h^2}, \quad (42)$$

где E_t — трансляционная энергия данной материальной точки. Подставим значение константы (42) в (41). Собственные значения параметра E_t зависят теперь от того, требуется ли вводить в какой-либо части всего пространства дополнительные слагаемые в потенциальной энергии или нет. Если это не требуется, то можно брать все положительные значения E_t , в то время как все отрицательные значения недопустимы. В самом деле, в этом случае уравнение (41) имеет решения, не равные нулю тождественно и ограниченные во всем пространстве тогда и только тогда, когда E_t положительно. Если же молекула находится в каком-либо «ящике», то это равносильно введению для функции g соответствующих граничных условий или, говоря точнее, резкому изменению уравнения (41) на поверхности ящика из-за появления новых членов в потенциальной энергии. Тем самым выделяется спектр дискретных собственных значений E_t , т. е. происходит «квантование трансляционного движения». Это обстоятельство было недавно мною рассмотрено в общих чертах, причем также было показано, что подобное квантование приводит к теории газов Эйнштейна *.

Зависящий от координат относительного движения частиц x, y, z множитель f из волновой функции ψ определяется теперь уравнением

$$\frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \right) + [a' - b'(r - r_0)^2] f = 0, \quad (43)$$

где для сокращения положено

$$a' = \frac{8\pi^2 (E - E_t)}{h^2}. \quad (39')$$

Введем теперь вместо координат x, y, z полярные координаты r, ϑ, φ (что согласуется с использованным ранее значением r). После умножения на μ получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial f}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \right\} + \\ + [\mu a' - \mu b'(r - r_0)^2] f = 0. \end{aligned} \quad (43')$$

Представим функцию f также в виде произведения функций. Множитель, зависящий от полярных углов, будет представлять собой сферическую функцию n -го порядка, и выражение, стоящее в фигурных скобках, равно $-n(n+1)f$.

Предположим, что это значение подставлено в формулу (43') и для простоты сохраним для зависящего от r множителя обозначение f . Введем затем

* См.: Phys. Z., 1926, 27, 95 [9].

в качестве новой искомой функции величину

$$\chi = rf \quad (44)$$

и в качестве независимой переменной величину

$$\rho = r - r_0. \quad (45)$$

После подстановки получаем

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial \rho^2} + \left[\mu a' - \mu b' \rho^2 - \frac{n(n+1)}{(r_0 + \rho)^2} \right] \chi = 0. \quad (46)$$

До сих пор вычисления удавалось проводить строго. Сделаем теперь известное приближение, причем я отмечаю, что приведенное ниже обоснование этого приближения нельзя считать полным. Сравним уравнение (46) со сходным по строению уже рассмотренным уравнением (22'), которое отличается от (46) лишь появлением у коэффициента перед неизвестной функцией дополнительных слагаемых, имеющих относительный порядок величины ρ/r_0 . Это можно увидеть, если разложить в ряд выражение

$$\frac{n(n+1)}{(r_0 + \rho)^2} = \frac{n(n+1)}{r_0^2} \left(1 - \frac{2\rho}{r_0} + \frac{3\rho^2}{r_0^2} - \dots \right), \quad (47)$$

подставить его в (46), сгруппировать члены с одинаковыми степенями ρ/r_0 и вести вместо ρ новую переменную ρ' , отличающуюся от ρ на малую величину:

$$\rho' = \rho - \frac{n(n+1)}{r_0^3 \left(\mu b' + \frac{3n(n+1)}{r_0^4} \right)}. \quad (48)$$

Уравнение (46) примет при этом вид

$$\frac{\partial^2 \chi}{\partial \rho'^2} + \left(a - b \rho'^2 + \left[\frac{\rho'}{r_0} \right] \right) \chi = 0, \quad (46')$$

где для сокращения положено

$$\begin{aligned} a &= \mu a' - \frac{n(n+1)}{r_0^2} \left(1 - \frac{n(n+1)}{r_0^4 \mu b' + 3n(n+1)} \right), \\ b &= \mu b' + \frac{3n(n+1)}{r_0^4}. \end{aligned} \quad (49)$$

Символ $[\rho'/r_0]$ в формуле (46') обозначает слагаемые более высокого порядка относительно величины ρ'/r_0 , чем наименьшие оставляемые члены.

Об уравнении (22'), с которым мы сейчас сравниваем уравнение (46'), нам известно, что его первая собственная функция заметно отлична от нуля лишь в некоторой малой области по обе стороны от начала координат. Только при более высоких порядковых числах эта область постепенно расширяется.

При небольших порядковых числах соответствующая область для уравнения (46') будет в действительности меньше r_0 , если подставить порядок величин молекулярных констант и отбросить член $[\rho'/r_0]$. Отсюда мы выводим то, я повторяю, нестрогое заключение, что для первой собственной функции, а также первого собственного значения подобным образом получается приемлемое приближение в области, где эта первая собственная функция вообще заметно отлична от нуля. Из прежнего условия для собственных значений (23), с помощью несложного вычисления, после возвращения к старым обозначениям вместо (49), (39) и (39') и введения для сокращения новой малой величины

$$\varepsilon = \frac{n(n+1)h^2}{16\pi^4\nu_0^2 r_0^4} = \frac{n(n+1)h^2}{16\pi^4\nu_0^2 A^2}, \quad (50)$$

получаются следующие уровни энергии:

$$E = E_t + \frac{n(n+1)h^2}{8\pi^2 A} \left(1 - \frac{\varepsilon}{1+3\varepsilon}\right) + \frac{2l+1}{2} h\nu_0 \sqrt{1+3\varepsilon} \quad (51)$$

$$(n=0, 1, 2, \dots; \quad l=0, 1, 2, \dots),$$

где, кроме того, использована запись момента инерции в виде

$$A = \mu r_0^2. \quad (52)$$

Говоря языком классической механики, величина ε представляет собой квадрат отношения частоты вращения к частоте колебания ν_0 и является поэтому в случае молекулы действительно малой величиной, так что формула (51) имеет обычное строение, если пренебречь связанными с ε малыми поправками и отмеченными ранее неточностями. Эта формула является синтезом формул (25') и (34), причем еще добавляет слагаемое трансляционной энергии E_t . Следует подчеркнуть, что качество приближения определяется не только малостью ε , малой должна также быть и величина l . Практически l действительно оказывается обычно небольшим числом.

Связанные с ε поправки в (51) еще не учитывают отклонение ядерных колебаний от чисто гармонического типа. Поэтому сравнение с формулой Кратцера (см.: *Зоммерфельд*, цит. соч.) или с экспериментом еще невозможно. Я привел данный случай только как пример того, каким образом сохраняется в волновой механике наглядное понятие равновесной конфигурации системы ядер, лишь в малой окрестности которой волновая амплитуда заметно отличается от нуля. Непосредственная интерпретация нашей волновой функции, зависящей от шести переменных, в трехмерном пространстве встречается с очевидными трудностями.

К вращательно-колебательной задаче для двухатомной молекулы при учете ангармонических членов в энергии связи придется поэтому еще возвратиться. Красивый прием, избранный Кратцером при классическом рассмотрении задачи, является простейшим также и в случае волновой механики [10].

При этом, однако, чтобы дойти до вычисления деталей полосатых спектров, приходится применить теорию возмущения собственных значений и собственных функций, т. е. учесть в этих значениях и функциях изменения, которые происходят, когда в коэффициенте перед неизвестной в дифференциальном уравнении добавляется малый «возмущающий член». Эта «теория возмущений» вполне аналогична соответствующей теории классической механики, причем проблема в данном случае более проста по той причине, что в волновой механике пользуются только линейными соотношениями. В первом приближении оправдывается утверждение, что возмущенные собственные значения равны «усредненному по невозмущенному движению» члену возмущения.

Теория возмущений значительно расширяет границы, в которых возможно аналитическое использование новой теории. Я могу уже здесь указать тот практически важный результат, что найденное выражение для эффекта Штарка первого порядка действительно совпадает с формулой Эпштейна, подтвержденной экспериментом [11].

Поступило 23 февраля 1926 г.

НЕПРЕРЫВНЫЙ ПЕРЕХОД ОТ МИКРО- К МАКРОМЕХАНИКЕ¹

Опираясь на идеи де Бройля * и Эйнштейна **, я уже пытался показать ***, что обыкновенные дифференциальные уравнения механики, определяющие координаты механической системы как функции времени, для достаточно «малых» систем больше не являются пригодными; их место должно занять дифференциальное уравнение в частных производных, определяющее некоторую переменную ψ («волновую функцию») как функцию координат и времени. Так же, как в случае уравнения колебаний струны или каких-либо других систем, ψ можно представить в виде суперпозиции чисто гармонических (т. е. «синусоидальных») колебаний, частоты которых в точности совпадают со спектроскопическими «частотами термов» микромеханических систем. Например, если для линейного планковского осциллятора **** с энергетической функцией

$$\frac{m}{2} \left(\frac{dq}{dt} \right)^2 + 2\pi^2 \nu_0^2 m q^2 \quad (1)$$

вместо отклонения q ввести безразмерную переменную

$$x = q \cdot 2\pi \sqrt{\frac{m\nu_0}{h}}, \quad (2)$$

то волновая функция ψ представима в виде суперпозиции следующих собственных колебаний *****:

$$\begin{aligned} \psi_n &= e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) e^{2\pi i \nu_n t}; \\ \nu_n &= \frac{2n+1}{2} \nu_0, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots, \end{aligned} \quad (3)$$

где H_n представляют собой полиномы Эрмита *. Результат их умножения

¹ E. Schrödinger. Naturwissenschaften, 1926, 14, Н. 28, 664. Перевод И. С. Алексеева.

* L. de Broglie. Ann. phys. (10), 1925, 3, 22 (Theses. Paris, 1924).

** A. Einstein. Berl. Ber., 1925, 9 ff.

*** E. Schrödinger. Ann. Physik, 1926, 79, 361, 489, 734. Следующие сообщения в печати.

**** Т. е. для материальной точки массы m , которая перемещается по прямой линии в окрестности некоторой фиксированной точки под воздействием силы, пропорциональной отклонению q от этой точки; согласно обычной механике такая материальная точка совершает синусоидальные колебания с частотой ν_0 .

***** i означает $\sqrt{-1}$. Справа, как обычно, следует взять действительную часть.

на $e^{-\frac{x^2}{2}}$ и на «нормирующий множитель» $(2^n n!)^{-1/2}$ будет называться в дальнейшем эрмитовыми ортогональными функциями. Они, стало быть, являются амплитудами собственных колебаний. Первые пять из них изображены

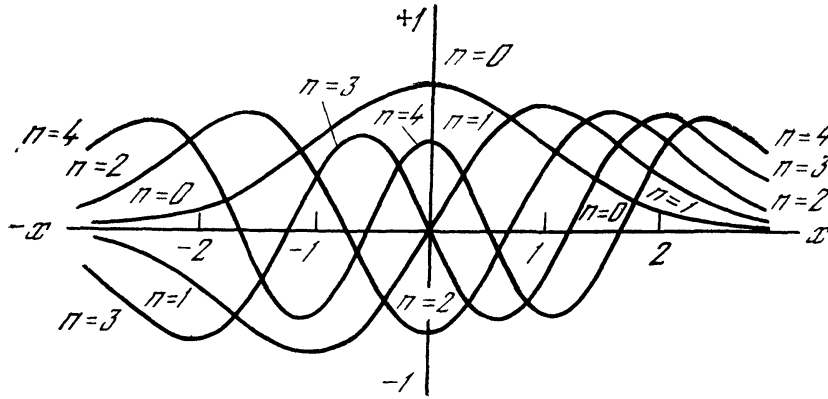


Рис. 1. Первые пять собственных колебаний планковского осциллятора согласно волновой механике

Вне изображенной на рисунке области $-3 \leq x \leq 3$ все пять функций монотонно приближаются к оси x

на рис. 1. Сходство с хорошо известной картиной колебаний струны выступает достаточно отчетливо.

Намерение описывать с помощью таких собственных колебаний процесс, который, как считалось до сих пор, относится к механике точки, кажется на первый взгляд довольно странной причудой. Здесь я хотел бы на одном специальном простом примере конкретно продемонстрировать переход к макроскопической механике, показав, что группа собственных колебаний с большими порядковыми числами n («квантовыми числами») и относительно небольшой разностью порядковых чисел («разностью квантовых чисел») может служить для изображения «материальной точки», которая совершает «движение», ожидаемое согласно обычной механике, т. е. колеблется с частотой ν_0 . Для этого я выберу некоторое число $A \gg 1$ (т. е. «много большее по сравнению с 1») и составлю следующую совокупность собственных колебаний:

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{A}{2}\right)^n \frac{\psi_n}{n!} = e^{\pi i \nu_0 t} \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{A}{2} e^{2\pi i \nu_0 t}\right)^n \cdot \frac{1}{n!} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x). \quad (4)$$

Они, таким образом, будут нормированными собственными колебаниями (см. выше) с коэффициентами

$$\frac{A^n}{\sqrt{2^n n!}} \quad (5)$$

* Ср.: R. Courant, D. Hilbert. Methoden der Mathematische Physik, Bd. 1. Berlin, Springer, 1914. Kap. 2, § 10, 4, S. 76.

и, как легко видеть *, образуют относительно узкую группу в окрестности коэффициента с номером n

$$n = \frac{A^2}{2}. \quad (6)$$

Суммирование в (4) проводится с помощью соотношения, одинакового относительно x и s **.

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{s^n}{n!} e^{-\frac{x^2}{2}} H_n(x) = e^{-s^2 + 2sx - \frac{x^2}{2}}. \quad (7)$$

Итак,

$$\psi = e^{\pi i \nu_0 t} - \frac{A^2}{4} e^{4\pi i \nu_0 t} + A x e^{2\pi i \nu_0 t} - \frac{x^2}{2}. \quad (8)$$

Беря справа, как указывалось выше, только действительную часть, после несложных выкладок получаем

$$\psi = e^{\frac{A^2}{4} - \frac{1}{2}(x - A \cos 2\pi \nu_0 t)^2} \cos \left[\pi \nu_0 t + (A \sin 2\pi \nu_0 t) \left(x - \frac{A}{2} \cos 2\pi \nu_0 t \right) \right]. \quad (9)$$

В этом окончательном результате первостепенный интерес представляет первый сомножитель. Он описывает относительно высокий и узкий «горб», похожий по форме на «гауссовскую кривую ошибок», который лежит в окрестности точки

$$x = A \cos 2\pi \nu_0 t. \quad (10)$$

Ширина этого горба имеет величину порядка 1, так что согласно сказанному выше она очень мала по сравнению с A . Согласно (10) горб осциллирует в точности по такому же закону, какой получается в обычной механике для материальной точки с энергетической функцией (1). Амплитуда, выраженная в единицах x , равна A , так что в единицах q она будет равна

$$a = \frac{A}{2\pi} \sqrt{\frac{h}{m\nu_0}}. \quad (11)$$

Для энергии материальной точки массы m , колеблющейся с этой амплитудой и с частотой ν_0 , обычная механика дает

$$2\pi^2 a^2 \nu_0^2 m = \frac{A^2}{2} h \nu_0, \quad (12)$$

т. е. согласно (6) в точности $n h \nu_0$, где n — среднее квантовое число группы. «Соответствие» является полным также и в этом отношении.

* $z^n/n!$ как функция n для больших значений z имеет единственный экстремум — относительно очень острый максимум при $n=z$. Извлекая квадратный корень, получаем для $z=A^2/2$ числовой ряд (5).

** R. Courant, D. Hilbert (см. выше), уравнение (58).

Второй множитель в выражении (9), вообще говоря, представляет собой очень быстро меняющуюся функцию как от x , так и от t , дающую в итоге вклад $\ll 1$. Она испещряет многочисленными узкими бороздами горб, даваемый первым множителем, в результате чего и образуется группа волн, изображение которой, весьма схематическое, воспроизведено на рис. 2. Масштаб оси абсцисс на рис. 2, естественно, гораздо мельче, чем на рис. 1. Рис. 2 следует увеличить в пять раз, чтобы его можно было непосредственно сравнивать с рис. 1.

Внимательное рассмотрение второго множителя в (9) обнаруживает следующую интересную деталь, которая на рис. 2, изображающем только

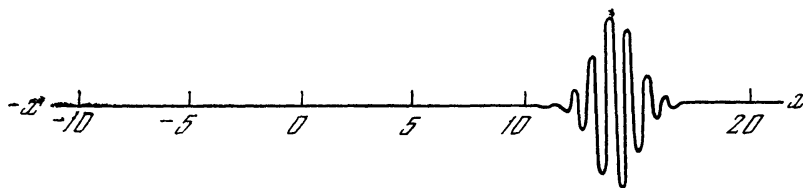


Рис. 2. Колеблущаяся группа волн как волномеханический образ материальной точки

один период, не нашла отражения. Число и ширина «борозд» (Furchen) или «волночек» (Wellchen), которые сопоставляются материальной точке, изменяются во времени. Эти «волночки» наиболее многочисленны и узки при прохождении через среднюю точку $x=0$. Они полностью сглаживаются в окрестности точек $x=\pm A$, потому что там согласно (10) $\cos 2\pi\nu_0 t = \pm 1$ и поэтому $\sin 2\pi\nu_0 t = 0$, так что второй множитель в (9) совершенно не зависит от x . Полная ширина группы волн («толщина материальной точки»), однако, остается всегда одной и той же. Такую изменчивость «ряби» можно истолковать как зависимость от скорости и, как таковую, полностью понять с общей волномеханической точки зрения. Однако мне не хотелось бы здесь углубляться в этот вопрос.

Наша группа волн прочно связана и не расплывается с течением времени по все большей области, как это обычно имеет место, например, в оптике. Естественно, что некоторое, сказанное здесь относительно одномерного случая, будет справедливым и для любого другого измерения горба. Легко показать, что путем перемножения двух или трех выражений типа (4), записанных одно для x , другое — для y , а третье — для z , можно представить плоский и, соответственно, пространственный осциллятор, т. е. плоскую или пространственную группу волн, гармонически обращающихся по эллипсу*. Каждая такая группа волн также остается прочно связанной в противополож-

* Небезынтересно заметить, что для плоского осциллятора квантовые уровни целочисленны, в то время как для пространственного осциллятора они опять становятся «полуцелыми». Аналогичное справедливо и для ротатора. Таким образом, имеющая столь важное значение для спектроскопии полуцелость связана с нечетным числом измерений пространства.

ность, скажем, волновому пакету классической оптики, расплывающемуся с течением времени. Это отличие возникает, по-видимому, от того, что наша группа построена из отдельных дискретных гармонических компонент, а не из континуума таковых.

В заключение я хотел бы еще отметить, что общая аддитивная постоянная (обозначим ее через C), которую, строго говоря, следует добавить в (3) ко всем ν_n (соответствующая «энергии покоя» материальной точки), ничего существенного не вносит. Она лишь добавляет в квадратные скобки выражения (9) слагаемое $2\pi C t$. Вследствие этого осцилляции внутри группы волн становятся со временем все более быстрыми, в то время как описываемые выражением (10) колебания группы как целого, а также их рябь совершенно этим не затрагиваются.

Это обстоятельство позволяет с достаточной уверенностью утверждать, что таким же образом можно сконструировать группы волн, которые обращаются на кеплеровских эллипсах, соответствующих большим квантовым числам, и представляют собой волновомеханический образ электронов в атоме водорода. Для этого случая вычислительные трудности будут больше, нежели в обсуждавшемся здесь особенно простом школьном примере^[1].

ОБ ОТНОШЕНИИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ ГЕЙЗЕНБЕРГА—БОРНА—ИОРДАНА К МОЕЙ¹

§ 1. Введение и обзор содержания

Учитывая крайнее отличие исходных пунктов и круга представлений гейзенберговской квантовой механики *, с одной стороны, и «волновой», или «физической», механики, как была названа изложенная здесь недавно в своих основных чертах теория **, с другой, довольно странным выглядит то обстоятельство, что обе эти новые квантовые теории совпадают друг с другом в отношении полученных к настоящему времени конкретных результатов, в том числе и в той области, где они отличаются от старой квантовой теории. В первую очередь я назову в этой связи странную «получелость» для осциллятора и ротатора. Это действительно является весьма странным, поскольку исходный пункт, представления, методы и весь математический аппарат в самом деле выглядят существенно различными. Однако, прежде всего, бросается в глаза, что в этих двух теориях отход от классической механики совершается прямо-таки в диаметрально противоположных направлениях. У Гейзенберга классические непрерывные переменные заменяются системами дискретных числовых величин (матрицами), зависящих от двух целочисленных индексов и определяемых с помощью алгебраических уравнений. Сами авторы называют свою теорию «истинной теорией прерывности» ***. Волновая механика, напротив, представляет собой шаг в прямо противоположную сторону от классической механики, в сторону теории континуума. Она подставляет на место конечного множества зависимых переменных, описывающих события посредством конечного числа дифференциальных уравнений в полных производных, одно непрерывное событие типа поля в конфигурационном пространстве, подчиняющееся единственному дифференциальному уравнению в частных производных, выводимому из принципа действия. Этот принцип действия и, соответственно, это дифференциальное уравнение заменяет уравнения движения и квантовые условия старой «классической квантовой теории» ****.

¹ E. Schrödinger. Ann. Physik, 1926, 79, 734. Перевод И. С. Алексеева.

* W. Heisenberg. Z. Phys., 1926, 33, 879; M. Born, P. Jordan. Ibid., 1925, 34, 858; 1926, 35, 557 (последняя в соавторстве с Гейзенбергом). Я позволю себе для краткости всюду в последующем изложении вместо трех авторов упоминать только Гейзенберга, а при цитировании двух последних статей называть их «Quantenmechanik. I, II» («Квантовая механика. I, II»). Интересный вклад в эту теорию сделал П. Дирак (Proc. Roy. Soc. London, 1925, 109, 642; 1926, 110, 561) [1].

** E. Schrödinger. Ann. Physik, 1926, 79, 361 (первое сообщение); 79, 489 (второе сообщение). Эта серия сообщений будет продолжена вне всякой зависимости от настоящей работы, цель которой — только установить связи между двумя подходами.

*** Quantenmechanik. I, S. 879.

**** Моя теория была стимулирована работой Л. де Бройля (Ann. Phys. (10), 1925, 3, 22 (Theses, Paris, 1924)) и короткими, но в высшей степени прозорливыми замечаниями

Ниже будет выявлена весьма тесная внутренняя взаимосвязь гейзенберговской квантовой механики и моей волновой механики. С формально-математической точки зрения ее, пожалуй, следует рассматривать как тождество (обеих теорий). Ход мысли при доказательстве этого разворачивается следующим образом.

Гейзенберговская теория связывает решение задачи квантовой механики с решением системы бесконечного числа алгебраических уравнений, в которых неизвестные — бесконечные матрицы — соответствуют классическим координатам и импульсам механических систем и функциям от них, подчиняясь специфическим вычислительным правилам. (Соответствие такое: одной координате, одному импульсу или одной функции от них всегда соответствует по одной бесконечной матрице.)

Прежде всего, я покажу здесь (§ 2 и 3), как каждой функции координат и импульсов можно поставить в соответствие такую матрицу, что эти матрицы всегда будут удовлетворять формальным вычислительным правилам Борна—Гейзенберга (к которым я отношу также так называемое «квантовое условие» или «перестановочное правило», см. ниже). Это соответствие между матрицами и функциями является всеобщим, оно совершенно не зависит от конкретной природы рассматриваемой механической системы, являясь одним и тем же для всех механических систем. (Другими словами, конкретный вид гамильтоновой функции не влияет на закон соответствия.) Однако, с другой стороны, указанное соответствие является все еще в высшей степени неопределенным. Оно осуществляется при посредничестве произвольной полной системы ортогональных функций, областью определения которых является все конфигурационное пространство (NB: не « pq -пространство», а « q -пространство»). Упомянутая выше неопределенность соответствия заключается в том, что в роли посредника можно взять произвольную ортогональную систему.

После такого весьма общего способа построения матриц, подчиняющихся общим вычислительным правилам, я покажу в § 4 следующее: решение конкретной системы алгебраических уравнений, характеризующих конкретную задачу и связывающих матрицы координат и импульсов с матрицей гамильтоновой функции (авторы именуют эту систему «уравнениями движения»), полностью осуществимо благодаря тому, что в роли посредника берется определенная ортогональная система, а именно — система собственных функций того дифференциального уравнения в частных производных, которое лежит в основе моей волновой механики. Решение естественной краевой задачи этого ортогонального уравнения полностью эквивалентно решению гейзенберговских алгебраических задач. Все гейзенберговские матричные элементы, которыми можно было интересоваться, только предполагая, что они определяют «вероятности перехода» или «интенсивности спектральных

Эйнштейна (Berl. Ber., 1925, S. 9 ff.). Какой-либо генетической взаимосвязи с Гейзенбергом я абсолютно не осознавал. Конечно, я знал о его теории, однако меня отпугивали, если не сказать отталкивали, казавшиеся мне очень трудными методы трансцендентной алгебры и отсутствие наглядности [2].

линий», оказываются действительно вычисляемыми с помощью дифференцирования и квадратур, как только решена краевая задача. Помимо этого указанным матричным элементам или величинам, находящимся с ними в тесном родстве, в волновой механике придается вполне наглядный смысл амплитуд парциальных колебаний электрического момента атома. Интенсивность и поляризацию испускаемого света, таким образом, оказывается возможным понять в рамках теории Максвелла—Лоренца. Краткий предварительный эскиз этой взаимосвязи составляет содержание § 5.

§ 2. Сопоставление оператора и матрицы надлежащим образом упорядоченному функциональному символу и установление правила для произведения

Исходный пункт при конструировании матриц состоит в простом замечании, что специфические правила вычислений Гейзенберга для функции $2n$ величин $q_1, q_2, \dots, q_n; p_1, p_2, \dots, p_n$ (координат и канонически сопряженных импульсов) в точности совпадают с правилами вычислений, которые справедливы согласно обычному анализу для линейных дифференциальных операторов, заданных в области n переменных $q_1, q_2, \dots, q_n$. Соответствие, устанавливаемое при этом, заключается в том, что каждое p_r в выражении для функции должно быть заменено оператором $\partial/\partial q_r$. В самом деле, оператор $\partial/\partial q_l$, перестановочный с $\partial/\partial q_m$ для произвольного m , является перестановочным с q_m только при условии, что $m \neq l$. Полученный посредством перестановки и вычитания оператор для $m=l$

$$\frac{\partial}{\partial q_l} q_l - q_l \frac{\partial}{\partial q_l} \quad (1)$$

при действии на произвольную функцию от q_k воспроизводит эту функцию, т. е. этот оператор является тождественным. Этот простой факт и изображается в области матриц в виде гейзенберговского перестановочного правила [3].

Руководствуясь этим ориентирующим предварительным замечанием, перейдем теперь к систематическому построению. Вследствие только что отмеченной «не всегда перестановочности» некоторому определенному оператору соответствует не какая-то определенная «функция в обычном смысле» от q_k, p_k , а некоторый «определенным образом записанный функциональный символ». Поскольку мы не можем применять к операторам $\partial/\partial q_k$ никаких иных операций, кроме сложения и умножения, функция q_k, p_k должна быть записана в виде регулярного степенного ряда, по крайней мере для p_k , чтобы можно было осуществить замену p_r на $\partial/\partial q_r$. Для нас достаточно рассмотреть какой-либо один член такого степенного ряда, скажем, функцию следующего вида:

$$F(q_k, p_k) = f(q_1, \dots, q_n) p_r p_s p_t g(q_1, \dots, q_n) p_{r'} h(q_1, \dots, q_n) p_{r''} p_{s'} \dots \quad (2)$$

Мы будем называть это выражение «надлежащим образом упорядоченным (wohlgeordnetes) функциональным символом» и поставим ему в соответствие следующий оператор:

$$[F, \cdot] = f(q_1, \dots, q_n) K^3 \frac{\partial^3}{\partial q_r \partial q_s \partial q_t} \times \\ \times g(q_1, \dots, q_n) K \frac{\partial}{\partial q_{r'}} h(q_1, \dots, q_n) K^2 \frac{\partial^2}{\partial q_{r''} \partial q_{s''}} \dots \quad (3)$$

При этом в целях несколько большей общности, чем в нашем ориентирующем предварительном замечании, p_r заменяется не просто на $\partial/\partial q_r$, а на $K \frac{\partial}{\partial q_r}$, где K обозначает некоторую универсальную константу. В качестве сокращенного обозначения оператора, соответствующего надлежащим образом упорядоченной функции F , я временно (т. е. только для данного доказательства) ввел символ $[F, \cdot]$. Символом $[F, u]$ я буду обозначать ту функцию (в обычном смысле) $q_1, q_2, \dots, q_n$, которая получается в результате действия этого оператора на некоторую функцию (в обычном смысле) $u(q_1, \dots, q_n)$. Если G представляет собой другую надлежащим образом упорядоченную функцию, то $[GF, u]$ будет обозначать функцию, получающуюся из функции u в результате применения к ней сначала оператора F , а затем оператора G ; или, что, по определению, то же самое, оператора GF . Это, конечно, вообще говоря, не совпадает с $[FG, u]$.

Теперь мы поставим в соответствие некоторой надлежащим образом упорядоченной функции типа F некоторую матрицу, используя в качестве посредствующего звена ее оператор (3) и некоторую произвольную полную ортогональную систему функций, определенных во всем q -пространстве. Сделаем это следующим образом. Для сокращения мы будем вместо совокупности переменных $q_1, \dots, q_n$ писать просто x , как это принято в теории интегральных уравнений, а символом $\int dx$ обозначать интеграл, распространенный на все q -пространство. Функции

$$u_1(x) \sqrt{\rho(x)}, \quad u_2(x) \sqrt{\rho(x)}, \quad u_3(x) \sqrt{\rho(x)}, \dots \quad (4)$$

должны образовывать полную, нормированную на единицу ортогональную систему. Следовательно, должно выполняться соотношение

$$\int \rho(x) u_i(x) u_k(x) dx = 0 \quad \text{для } i \neq k, \\ = 1 \quad \text{для } i = k. \quad (5)$$

Ниже будет доказано, что эти функции на границе q -пространства (вообще говоря, на бесконечности) достаточно быстро стремятся к нулю, благодаря чему граничные интегралы, возникающие в качестве побочного результата

при интегрировании по частям, о котором речь пойдет в дальнейшем, также обращаются в нуль.

Определенной с помощью (2) функции F с оператором (3) мы поставим теперь в соответствие следующую матрицу:

$$F^{kl} = \int \rho(x) u_k(x) [F, u_l(x)] dx. \quad (6)$$

(Способ написания индексов в левой части не должен наводить на мысль о «контравариантности»; с этой точки зрения, которую мы здесь не имеем в виду, следовало бы писать один индекс вверх, а другой вниз; мы пишем матричные индексы вверх, потому что впоследствии должны будем записать также матричные элементы, соответствующие самим q_k, p_k , в которых используются нижние индексы.) Другими словами, способ вычисления некоторого матричного элемента состоит в том, что функция, принадлежащая к ортогональной системе и обозначенная индексом, соответствующим номеру строки (под которой мы всегда понимаем u_i , а не $u_i \sqrt{\rho}$), вместе с «весовой функцией» ρ и оператором умножается на ортогональную функцию, имеющую индекс, равный номеру столбца, после чего выполняется интегрирование по области их определения *.

Нетрудно показать, что аддитивное и мультипликативное объединение надлежащим образом упорядоченных функций, а также относящихся к ним операторов отображается для соответствующих матриц в виде матричного сложения и умножения. Для сложения это тривиально. Для умножения доказательство проводится следующим образом.

Пусть G будет какой-либо надлежащим образом упорядоченная функция, отличная от F , а

$$Q^{lm} = \int \rho(x) u_l(x) [G, u_m(x)] dx \quad (7)$$

— соответствующая ей матрица. Нам надо получить матрицу произведения $(FG)^{km} = \sum_l F^{kl} G^{lm}$. Прежде чем записать ее, преобразуем выражение (6)

для F^{kl} следующим образом. С помощью нескольких последовательно выполняемых интегрирований по частям оператор $[F, \cdot]$ «переводится» с функции $u_l(x)$ на функцию $\rho(x) u_k(x)$. Употребляя выражение «переводить» (вместо приблизительного «передвигать»), я хочу указать, что последовательность выполнения операций при этом оказывается прямо противоположной. Получающиеся в качестве «побочного продукта» граничные интегралы должны обращаться в нуль (см. выше). «Переведенный» оператор, с учетом нечетного числа изменений знака, происходящих в результате дифференцирований,

* Коротче говоря, F^{kl} представляет собой k -й «коэффициент разложения» результата применения оператора к функции u_l .

будем обозначать символом $[\bar{F}, \cdot]$. Для выражения (3), например,

$$[\bar{F}_1 \cdot] = (-1)^\tau \dots K^2 \frac{\partial^2}{\partial q_{s''} \partial q_{r''}} h(q_1, \dots, q_n) \times \\ \times K \frac{\partial}{\partial q_{r'}} g(q_1, \dots, q_n) K^3 \frac{\partial^3}{\partial q_t \partial q_s \partial q_r} f(q_1, \dots, q_n) \quad (3')$$

(τ — число дифференцирований).

Применение введенных обозначений дает

$$F^{kl} = \int u_l(x) [\bar{F}, \rho(x) u_k(x)] dx. \quad (6')$$

Вычисляя матрицу произведения, получим

$$\sum_l F^{kl} G^{lm} = \sum_l \left\{ \int u_l(x) [\bar{F}, \rho(x) u_k(x)] dx \cdot \int \rho(x) u_l(x) [G, u_m(x)] dx \right\} = \\ = \int [\bar{F}, \rho(x) u_k(x)] [G, u_m(x)] dx. \quad (8)$$

Последнее уравнение представляет собой не что иное, как так называемое «условие полноты» нашей ортогональной системы * применительно к «коэффициентам разложения» функций

$$[G, u_m(x)] \quad \text{и} \quad \frac{1}{\rho(x)} [\bar{F}, \rho(x) u_k(x)].$$

Теперь, снова интегрируя по частям, мы продолжим переводение оператора $[\bar{F}, \cdot]$, переводя его с функции $\rho(x) u_k(x)$ на функцию $[G, u_m(x)]$; при этом данный оператор опять приобретает свой прежний вид. Результат очевиден:

$$(FG)^{km} = \sum_l F^{kl} G^{lm} = \int \rho(x) u_k(x) [FG, u_m(x)] dx. \quad (9)$$

Слева стоит km -й элемент матрицы произведения, справа согласно закону соответствия (6) — km -й элемент матрицы, соответствующий надлежащим образом упорядоченному произведению FG , что и требовалось доказать.

§ 3. Квантовое условие Гейзенберга и правила для частного дифференцирования

Поскольку операция (1) является тождественной, то, согласно нашему правилу соответствия, ей сопоставляется надлежащим образом упорядоченная функция

$$p_l q_l - q_l p_l, \quad (10)$$

* См., например: R. Courant, D. Hilbert. Methoden der Mathematischen Physik. Bd. 1, S. 36. При этом важно помнить, что условие полноты для «коэффициентов разложения» выполняется в любом случае, в том числе и тогда, когда само разложение не сходится. В случае его сходимости соотношение (8) является непосредственно очевидным.

которая, как мы помним, содержит еще некоторую универсальную постоянную K — оператор умножения на K . Таким образом, функции (10) соответствуют матрица

$$\begin{aligned}(p_i q_i - q_i p_i)^{ik} &= K \int \rho(x) u_i(x) u_k(x) dx = 0 && \text{для } i \neq k \\ &= 1 && \text{для } i = k.\end{aligned}\quad (11)$$

Это представляет собой не что иное, как гейзенберговское «квантовое соотношение», если положить

$$K = \frac{h}{2\pi\sqrt{-1}}. \quad (12)$$

Впредь мы будем считать это зафиксированным. Само собой разумеется, что мы могли бы получить соотношение (11) и другим способом: перемножая в различной последовательности матрицы

$$\begin{aligned}q_i^{ik} &= \int q_i \rho(x) u_i(x) u_k(x) dx, \\ p_i^{ik} &= K \int \rho(x) u_i(x) \frac{\partial u_k(x)}{\partial q_i} dx\end{aligned}\quad (13)$$

и вычитая один результат из другого.

Обратимся теперь к «правилам для частного дифференцирования». Частным дифференцированием надлежащим образом упорядоченной функции типа (2) по q_i следует называть * дифференцирование по q_i каждого из тех ее сомножителей, в которые входит q_i , без изменения порядка их последовательности, и сложение всех полученных результатов. Имея это в виду, легко показать, что для операторов будет выполняться следующее уравнение:

$$\left[\frac{\partial F}{\partial q_i}, \cdot \right] = \frac{1}{K} [p_i F - F p_i, \cdot]. \quad (14)$$

Ход рассуждений при этом таков. Вместо того чтобы действительно проводить дифференцирование по q_i , мне удобнее просто писать сначала p_i , которое затем при переходе к операторам всюду будет заменено на $K \frac{\partial}{\partial q_i}$. При этом я должен лишь, во-первых, выполнить деление на K . Во-вторых, после такой замены нужно иметь в виду, что если полный оператор применяется к какой-либо функции u , то оператор $\partial/\partial q_i$ будет действовать не только на те части F , которые содержат q_i (как должно быть), но также и на подвер-

* Во всех этих определениях мы, конечно, следуем Гейзенбергу. Со строго логической точки зрения следующее ниже доказательство, собственно говоря, является излишним, и мы могли бы сразу написать выражения для правил (14) и (15), так как они доказаны Гейзенбергом и основываются исключительно на правилах сложения, умножения, а также на правиле перестановки (11), которое мы только что доказали.

гаемую действию полного оператора функцию u , чего быть не должно. Этот недостаток я и исправляю тем, что вычитаю операцию $[Fp_i, \cdot]!$

Рассмотрим теперь частное дифференцирование по некоторому p_i . Его смысл для некоторой надлежащим образом упорядоченной функции типа (2) даже еще более прост, чем для $\partial/\partial q_i$, потому что p_k входит в ее выражение только в виде произведений степеней. Представим себе, что каждая степень p_i разложена на отдельные множители (например, запишем $p_i p_i p_i$ вместо p_i^3). После этого можем сказать следующее: при частном дифференцировании по p_i каждое отдельное p_i , входящее в F , следует по одному разу исключить (при этом все остальные p_i остаются на месте); все полученные результаты нужно сложить. Как это отражается на операторе (3)? «Каждое отдельное $K \frac{\partial}{\partial q_i}$ следует по одному разу исключить; все таким образом полученные результаты нужно сложить». Я утверждаю, что согласно этому рассуждению, выполняется операторное уравнение:

$$\left[\frac{\partial F}{\partial p_i}, \cdot \right] = \frac{1}{K} [Fq_i - q_i F, \cdot]. \quad (15)$$

Действительно, я представляю оператор $[Fq_i, \cdot]$ построенным и пытаюсь теперь в этом операторе «продвинуть q_i через F справа налево», что должно иметь смысл получения оператора $[q_i F, \cdot]$ путем последовательных перестановок. Осуществление такого продвижения встречает только одно препятствие, заключающееся в том, что я часто наталкиваюсь на $\partial/\partial q_i$. Я должен не просто переставлять q_i с этим выражением, но и заменять при этом внутри оператора

$$\frac{\partial}{\partial q_i} \quad \text{на} \quad 1 + q_i \frac{\partial}{\partial q_i}. \quad (16)$$

Возникающие благодаря наличию этого единичного оператора дополнительные результаты перестановки, как легко видеть, как раз образуют искомую «частную производную». По окончании продвижения остается еще лишний оператор $[q_i F, \cdot]$, который поэтому и вычитается в (15). Тем самым (15) также является доказанным.

Доказанные для операторов уравнения (14) и (15), естественно, остаются справедливыми и для матриц, соответствующих левой и правой части этих уравнений, поскольку согласно (6) одному линейному оператору соответствует одна и только одна матрица (конечно, при условии предварительного выбора конкретного вида системы функций $u_i(x)$)*.

* Попутно заметим, что для этого утверждения справедливо также и обратное, по крайней мере в том смысле, что согласно нашему правилу соответствия (6) при условии задания ортогональной системы и весовой функции какой-либо заданной матрице может соответствовать, по-видимому, не более чем один линейный дифференциальный оператор. Действительно, пусть в (6) F^{ki} будут заданы, $[F, \cdot]$ пусть будет искомым линейным оператором, существование которого мы предполагаем, а $\varphi(x)$ пусть будет некоторая кусочно-непрерывная и, в случае необходимости, достаточное число раз дифференцируе-

§ 4. Решение гейзенберговских уравнений движения

Итак, мы показали, что матрицы, построенные согласно определениям (3) и (6) из надлежащим образом упорядоченных функций с помощью произвольной полной ортогональной системы (4), удовлетворяют всем правилам вычислений Гейзенберга, в том числе и перестановочному правилу (11). Теперь мы впервые рассмотрим конкретную механическую задачу, характеризующуюся определенной гамильтоновой функцией

$$H(q_k, p_k). \quad (17)$$

Авторы квантовой механики непосредственно заимствуют эту функцию из обычной механики, откуда она, естественно, получается не в «надлежащем образом упорядоченном» виде, потому что в обычном анализе отсутствует зависимость от последовательности сомножителей. Далее, для целей квантовой механики они определенным образом «нормализуют» или «симметризируют» эту функцию, в результате чего, к примеру, обычная механическая функция $q_k p_k^2$ заменяется либо на

$$\frac{1}{2} (p_k^2 q_k + q_k p_k^2),$$

мая, а в остальном совершенно произвольная функция переменных $q_1, q_2, \dots, q_n$. Тогда условие полноты применительно к функциям $\varphi(x)$ и $[F, u_k(x)]$ дает следующее:

$$\begin{aligned} \int \rho(x) \varphi(x) [F, u_k(x)] dx = \\ = \sum_l \left\{ \int \rho(x) \varphi(x) u_l(x) dx \int \rho(x) u_l(x) [F, u_k(y)] dx \right\}. \end{aligned}$$

Правую часть можно считать однозначно определенной, так как в нее входят только коэффициенты разложения $\varphi(x)$ и заданные матричные элементы F_{lk} . Путем «переведения» (см. выше) можно преобразовать левую часть в k -й коэффициент разложения функции

$$\frac{[F, \rho(x) \varphi(x)]}{\rho(x)}.$$

Таким образом, все коэффициенты разложения этой функции являются однозначно определенными, а вместе с ними также и сама функция (*R. Courant, D. Hilbert, S. 37*). Но так как $\rho(x)$ является заданной, а $\varphi(x)$ — совершенно произвольной функцией, то мы можем сказать: результат действия переведенного оператора на произвольную функцию, от которой требуется только возможность подвергаться действию оператора, однозначно определяется с помощью матрицы F_{kl} . Но это означает не что иное, как однозначную определенность переведенного оператора, потому что понятие «оператор» идентично с логической точки зрения полному набору результатов его действия. Из переведенного же оператора с помощью перевода можно однозначно получить сам искомый оператор.

Следует иметь в виду, что разложимость функций, о которых шла речь, заранее предполагаться не должна. Мы не доказали также, что для произвольной матрицы всегда существует линейный оператор.

либо на

$$p_k q_k p_k,$$

либо на

$$\frac{1}{3} (p_k^2 q_k + p_k q_k p_k + q_k p_k^2).$$

Все эти выражения, согласно (11), эквивалентны. В результате эта функция с необходимостью становится «надлежащим образом упорядоченной»; это значит, что последовательность ее сомножителей необходимо рассматривать как неприкосновенную. Я не буду здесь затрагивать вопрос об общем правиле симметризации*; с точки зрения авторов квантовой механики, если я ее правильно понимаю, H^{ik} должна быть диагональной матрицей. Что же касается симметризованной функции, понимаемой как функция обычного анализа, то она должна быть тождественной первоначально заданной**. Мы будем непосредственно руководствоваться этими требованиями.

Далее авторы выдвигают требование, чтобы матрицы q_l^{ik} , p_l^{ik} удовлетворяли бесконечной системе уравнений, которую они рассматривают как «уравнения движения» и первоначально записывают следующим образом:

$$\left(\frac{dq_l}{dt}\right)^{ik} = \left(\frac{\partial H}{\partial p_l}\right)^{ik}, \quad \left(\frac{dp_l}{dt}\right)^{ik} = \left(-\frac{\partial H}{\partial q_l}\right)^{ik},$$

$$l = 1, 2, 3, \dots, n; \quad i, k = 1, 2, 3, \dots \quad (18)$$

Пара верхних индексов, точно так же как ранее у F^{kl} , относится к элементу матрицы, сопоставленной соответствующей надлежащим образом упорядоченной функции. Смысл частных производных в правой части тоже был разъяснен, что нельзя сказать о производной d/dt , фигурирующей в левой части. Относительно нее авторы предполагают следующее: должна существовать такая последовательность чисел

$$\nu_1, \nu_2, \nu_3, \nu_4, \dots, \quad (19)$$

что упомянутые выше уравнения удовлетворяются, если производной d/dt придан смысл умножения ik -го матричного элемента на $2\pi\sqrt{-1}(\nu_i - \nu_k)$. Таким образом, в частности,

$$\left(\frac{dq_l}{dt}\right)^{ik} = 2\pi\sqrt{-1}(\nu_i - \nu_k) q_l^{ik}, \quad \left(\frac{dp_l}{dt}\right)^{ik} = 2\pi\sqrt{-1}(\nu_i - \nu_k) p_l^{ik}. \quad (20)$$

Числовая последовательность (19), однако, не может быть задана заранее — вместе с матричными элементами q_l^{ik} , p_l^{ik} она образует числовые неизвестные

* Quantenmechanik, I, S. 873.

** Более сильное требование: должна удовлетворять тем же самым квантовомеханическим уравнениям движения — я считаю чрезмерно узким. По моему мнению, оно проистекает от того, что авторы ограничили себя и относительно q_k , также беря их исключительно в виде степенных произведений, что вовсе не обязательно.

системы уравнений (18). С учетом разъяснения смысла символа для производной (20), правил вычислений (14) и (15), а также принимая во внимание (12), этой системе можно придать следующий вид:

$$(\nu_i - \nu_k) q_l^{ik} = \frac{1}{h} (H q_l - q_l H), \quad (\nu_i - \nu_k) p_l^{ik} = \frac{1}{h} (H p_l - p_l H) \quad (18')$$

(после сокращения на $2\pi\sqrt{-1}$).

Этой системе уравнений, следовательно, мы должны удовлетворить, и для этого у нас нет никакого другого средства, кроме как подходящим образом выбрать ортогональную систему (4), с помощью которой образуются матрицы. В связи с этим я утверждаю следующее:

1. Всем уравнениям (18') можно удовлетворить, если в качестве ортогональной системы взять собственные функции естественной краевой задачи на собственные значения для дифференциального уравнения в частных производных

$$-[H, \psi] + E\psi = 0, \quad (21)$$

где ψ — неизвестная функция $q_1, q_2, \dots, q_n$; E — параметр собственных значений. В качестве весовой функции $\rho(x)$ выступает, само собой разумеется, та самая функция от $q_1, q_2, \dots, q_n$, на которую нужно умножить уравнение (21), чтобы сделать его самосопряженным. Величины ν_i оказываются равными собственным значениям E_i , разделенным на h . H^{kl} будет тогда диагональной матрицей с $H^{kk} = E_k$.

2. Если симметризация функции H проведена надлежащим образом — процесс симметризации пока, по-моему, еще не является однозначно определенным, — то тогда (21) идентично с волновым уравнением, лежащим в основе моей волновой механики *.

Утверждения 1 являются почти непосредственно очевидными, если пока не обращать внимания на вопросы: приводит ли уравнение (21) в общем случае к разумной краевой задаче на собственные значения, областью постановки которой является все q -пространство; всегда ли посредством умножения на подходящую функцию оно может быть сделано самосопряженным и т. п. Эти вопросы в значительной мере находят свое разрешение в пункте 2.

Так как согласно (21) и определению собственных значений и собственных функций

$$[H, u_i] = E_i u_i, \quad (22)$$

то согласно (6)

$$\begin{aligned} H^{kl} &= \int \rho(x) u_k(x) [H, u_l(x)] dx = E_l \int \rho(x) u_k(x) u_l(x) dx = \\ &= 0 \quad \text{для } l \neq k, \quad = E_l \quad \text{для } l = k \end{aligned} \quad (23)$$

и, например,

$$(H q_l)^{ik} = \sum_m H^{im} q_l^{mk} = E_i q_l^{ik}, \quad (q_l H)^{ik} = \sum_m q_l^{im} H^{mk} = E_k q_l^{ik}, \quad (24)$$

* Ann. Physik, 79, 510, 1926 (уравнение 18'') [4].

так что правая часть первого уравнения (18') содержит собственное значение

$$\frac{E_i - E_k}{h} q_i^{ik}. \quad (25)$$

Совершенно аналогичное справедливо для второго уравнения. Тем самым все утверждения пункта 1 доказаны.

Обратимся теперь к утверждению 2, т. е. к совпадению оператора гамильтоновой (надлежащим образом симметризованной) функции, взятого со знаком «минус», с волновым оператором волновой механики. Предварительно я разъясню на одном простом примере, почему мне с самого начала кажется не однозначным процесс симметризации. Пусть для одной степени свободы функция Гамильтона будет иметь вид

$$H = \frac{1}{2} (p^2 + q^2). \quad (26)$$

Далее можно, конечно, во-первых, не изменяя вида этой функции, принять ее в качестве «надлежащим образом упорядоченной функции в квантовой механике». Но можно также — а именно это, как мне кажется, с самого начала является столь же правильным — использовать надлежащим образом упорядоченную функцию

$$H = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{f(q)} p f(q) p + q^2 \right), \quad (27)$$

где $f(q)$ представляет собой в широких пределах произвольную функцию, $f(q)$ в этом случае входит в (27) в качестве «весовой функции» $\rho(x)$. Совершенно очевидно, что (26) является лишь специальным случаем (27), и возникает вопрос, всегда ли можно (и, если да, то как) выделить специальный случай, о котором идет речь, также и для H -функций общего, т. е. более сложного, вида. Ограничиваться ради этого только способом вхождения q_k в виде степенных произведений (по отношению к которым можно было бы, конечно, просто запретить «образование знаменателей») оказывается очень неудобным в весьма важных случаях. Кроме того, как я полагаю, это не приводит к правильной симметризации.

Для удобства читателей я воспроизведу здесь краткий вывод волнового уравнения в подходящей для нашей цели форме. Я ограничусь случаем классической механики (предполагая отсутствие релятивистских эффектов и магнитного поля). Итак, пусть имеется

$$H = T(q_k, p_k) + V(q_k) \quad (28)$$

и T является квадратичной формой относительно p_k . Тогда волновое уравнение может быть получено * из следующей вариационной задачи:

$$\delta J_1 = \delta \int \left\{ \frac{h^2}{4\pi^2} T \left(q_k, \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) + \psi^2 V(q_k) \right\} \Delta_p^{-1/2} dx = 0 \quad (29)$$

с дополнительным условием $J_2 = \int \psi^2 \Delta_p^{-1/2} dx = 1$.

* Ann. Physik, 1926, 79, 376, формулы (23) и (24) [5].

Как и выше, $\int dx$ обозначает $\int \dots \int dq_1, dq_2, \dots, dq_n$, $\Delta_p^{-1/2}$ представляет собой обратный квадратный корень из определителя квадратичной формы T . Без этого множителя обойтись нельзя, потому что иначе весь процесс не будет инвариантным относительно точечных преобразований q_k ! Конечно, вместо него можно было бы добавить в качестве множителя еще одну явную (explizite) функцию q_k , т. е. функцию, которая остается инвариантной относительно какого-либо точечного преобразования q_k . (Для Δ_p это, как известно, не имеет места, в противном случае можно было бы ликвидировать $\Delta_p^{-1/2}$, взяв эту дополнительную функцию в виде $\Delta_p^{1/2}$.)

Обозначая индексом p_k производную T по тому аргументу, который первоначально имел смысл p_k , мы получим в качестве результата варьирования

$$0 = \frac{1}{2} (\delta J_1 - E \delta J_2) = \int \left\{ -\frac{h^2}{8\pi^2} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left(\Delta_p^{-1/2} T_{p_k} \left(q_k, \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) \right) + \right. \\ \left. + (V(q_k) - E) \Delta_p^{-1/2} \psi \right\} \delta \psi dx. \quad (30)$$

Таким образом, вариационное уравнение Эйлера принимает вид [6]

$$\frac{h^2}{8\pi^2} \Delta_p^{1/2} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left\{ \Delta_p^{-1/2} T_{p_k} \left(q_k, \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) \right\} - V(q_k) \psi + E \psi = 0. \quad (31)$$

Нетрудно видеть, что это уравнение имеет форму (21), если вспомнить наше правило соответствия операторов и принять во внимание уравнение Эйлера для однородных функций, примененное к квадратичной форме T :

$$T(q_k, p_k) = \frac{1}{2} \sum_k p_k T_{p_k}(q_k, p_k). \quad (32)$$

Действительно, если в левой части (31), за исключением члена $E\psi$, описывающего собственные значения, выделить оператор и заменить в нем

$\frac{h}{2\pi\sqrt{-1}} \frac{\partial}{\partial q_k}$ на p_k , то согласно (32) получится взятая с обратным знаком функция Гамильтона (28). При этом процесс варьирования совершенно автоматически приводит к однозначно определенной «симметризации» этого оператора, которая делает его с точностью до некоторого множителя самосопряженным и инвариантным относительно точечных преобразований. Этого я хотел бы придерживаться, говоря о не вполне определенном основании для введения упоминавшегося выше * дополнительного множителя под интеграла (89) и для выбора определенного вида последнего.

Таким образом, решение всей системы матричных уравнений Гейзенберга—Борна—Йордана сводится к естественной краевой задаче на соб-

* См. также: Ann. Physik, 1926, 79, 362 (примечание), 510 [7].

ственные значения для некоторого линейного дифференциального уравнения в частных производных. Если эта задача решена, то оказывается возможным вычислить любой интересующий нас матричный элемент с помощью дифференцирований и квадратур, руководствуясь (6).

Для разъяснения того, что следует понимать под естественной краевой задачей на собственные значения, т. е. под естественными краевыми условиями на естественной границе конфигурационного пространства, я сошлюсь на результаты проведенных ранее расчетов *. Кажется закономерным, что естественная бесконечно удаленная граница образует сингулярность дифференциального уравнения и допускает однозначно только одно краевое условие «оставаться конечным». По-видимому, эта характерная особенность должна быть учтена в первую очередь при дальнейшем применении теории к решению задач микромеханики. Если область допустимых значений координат искусственно ограничена (пример: молекула в «ящике»), то это ограничение в принципе можно учесть хорошо известным способом — путем введения потенциальной энергии специально подобранного вида. Обращение в нуль собственных функций на границе также, вообще говоря, выполняется в еще большей степени даже в том случае, когда имеются определенные с помощью интегралов (6) соотношения. Этот вопрос требует специального обсуждения, в которое я не хотел бы вдаваться (речь идет о тех самых матричных элементах для кеплеровской задачи, которые, согласно Гейзенбергу, соответствуют переходу между гиперболическими траекториями).

Здесь я ограничился случаем классической механики в отсутствие магнитного поля, поскольку релятивистски-магнитное обобщение еще не представляется мне достаточно ясным. Тем не менее вряд ли можно сомневаться в том, что полный параллелизм двух новых квантовых теорий будет иметь место и в этом более общем случае.

Еще одно, последнее, общее замечание по поводу всего математического аппарата § 2, 3 и 4. Лежащая в основе всех фигурирующих там формул ортогональная система считалась непременно дискретной системой функций. Однако в очень важных случаях дело обстоит как раз наоборот. Не только для атома водорода, но также и для атомов, занимающих более высокое место в периодической системе, волновое уравнение (31), кроме линейчатого спектра, должно обладать также и непрерывным спектром собственных значений, который проявляется, между прочим, в непрерывных оптических спектрах, примыкающих к границам серий. Выше представлялось более удовлетворительным временно не перегружать формулы и рассуждения этим в действительности необходимым обобщением. Главная цель этого замечания заключается в том, чтобы с максимально возможной ясностью разработать формальную взаимосвязь обеих теорий, которая, конечно, существенно не изменится, если ввести в рассмотрение непрерывный спектр. Важная предосторожность относительно сходимости разложения по соб-

* См. цитированные выше работы.

ственными функциям, предполагавшейся выше не без оговорок, соблюдалась нами всегда. Эта предосторожность оказывается в высшей степени настоятельной вследствие сгущения дискретных собственных значений в конечной области (на границе серии), что, со своей стороны, теснейшим образом связано с появлением непрерывного спектра.

§ 5. Сравнение обеих теорий.

Перспектива классического понимания интенсивности и поляризации испускаемого излучения

Если обе квантовые теории (а я вполне мог бы употребить здесь и единственное число) в том виде, как они сформулированы к настоящему времени, оказываются надежно установленными, т. е. допускающими правильное обобщение также и на сложные системы *, то всякий спор по поводу преимущества одной из них в некотором смысле является беспредметным. С чисто математической точки зрения они совершенно эквивалентны, так что спорить здесь можно только по поводу второстепенного с принципиальной точки зрения вопроса о вычислительных удобствах.

В наши дни найдется немало физиков, которые, подобно Кирхгофу и Маху, видят задачу физической теории исключительно в возможно экономном математическом описании эмпирических связей между наблюдаемыми величинами, т. е. в описании, которое воспроизводит эти связи, по возможности не прибегая к помощи принципиально ненаблюдаемых элементов. При такой установке математическая эквивалентность почти равнозначна физической. В данном случае можно было бы увидеть некоторое преимущество матричного представления, самое большее в том, что оно, в силу отсутствия наглядности, не побуждает к тому, чтобы строить пространственно-временные образы атомных событий, которые, по-видимому, должны оставаться принципиально неконтролируемыми. Однако в этой связи представляет интерес следующее дополнение к проведенному выше доказательству эквивалентности: если эквивалентность действительно имеет место, она имеет место также и в обратном направлении. Оказывается возможным не только построить, как было показано выше, матрицы из собственных функций, но также и обратное — из численно заданных матриц сконструировать собственные функции. Таким образом, последние образуют не просто некоторое произвольное и специальное, удовлетворяющее потребность в наглядности, «телесное одеяние» («fleischliche Umkleidung») голого матричного

* Есть одна специальная причина считать это сомнительным. Обе теории пока заимствуют энергетическую функцию из обычной механики. В нее входит потенциальная энергия, описывающая в рассмотренных к настоящему времени случаях взаимодействие точек, из которых, по-видимому, по крайней мере одна — вследствие ее большой массы — может рассматриваться как точечная, а так же и волномеханически (ср.: *A. Einstein. Berl. Ber., 1925, S. 10*) [8]. Нужно считаться, однако, с возможностью того, что перенос утверждения о потенциальной энергии из обычной механики больше не окажется позволительным, если оба «точечных заряда» в действительности являются размазанными колебательными состояниями, проникающими друг в друга.

скелета; если бы это было так, то это обосновывало бы теоретико-познавательное преимущество последнего.

В уравнениях

$$q_i^k = \int u_i(x) u_k(x) dx \quad (33)$$

левые части подразумеются численно заданными, а функции $u_i(x)$ — искомыми (NB: «весовая функция» намеренно опущена, $u_i(x)$ должны пока сами быть ортогональными функциями). Далее, посредством матричного умножения, при котором, между прочим, не требуется никакого «передвигания», т. е. интегрирования по частям, можно вычислить интегралы

$$\int P(x) u_i(x) u_k(x) dx, \quad (34)$$

где $P(x)$ обозначает какое-либо произведение степеней q_l . Совокупность этих интегралов с фиксированными i и k образует то, что можно назвать совокупностью «моментов» функции $u_i(x) u_k(x)$. Известно, что при весьма общих предположениях функция однозначно определяется через совокупность своих моментов. Таким образом, все произведения $u_i(x) u_k(x)$ являются однозначно определенными, в том числе также и квадраты $u_i^2(x)$, а следовательно, и сами $u_i(x)$. Единственный произвольный пункт здесь заключается в последующем отделении весовой функции $\rho(x)$, например $r^2 \sin \vartheta$ для сферических координат. В этом отношении, во всяком случае, не следует опасаться теоретико-познавательной ошибки.

В остальном, однако, тезис о равнозначности математической и физической эквивалентности, вообще говоря, оказывается справедливым лишь при определенных условиях. Рассмотрим, например, электростатическую энергию системы заряженных проводников. Ее можно выразить двумя способами: в виде пространственного интеграла $\frac{1}{2} \int \mathcal{E}^2 dt$ и в виде суммы по проводникам $\frac{1}{2} \sum e_i V_i$. В электростатике оба этих выражения полностью эквивалентны — с помощью интегрирования по частям одно выражение может быть получено из другого. Тем не менее мы предпочитаем использовать первое, говоря, что именно оно правильно выражает пространственную локализацию энергии. В рамках электростатики такое предпочтение, конечно, не может быть обосновано; это можно сделать, только указав, что первое выражение остается справедливым также и в электродинамике, в то время как в отношении второго это сказать нельзя.

С этой точки зрения вопрос о том, которую из двух новых квантовых теорий следует предпочесть, в настоящее время вряд ли еще может быть разрешен определенным образом. Да не будет мне поставлено в вину, однако, если я, являясь естественно защитником одной из них, откровенно — и, по возможности, избегая явной односторонности — выдвину ряд аргументов, свидетельствующих в ее пользу.

Помимо собственно оптических вопросов при дальнейшем развитии атомной динамики возникают проблемы, постановка которых в рамках

экспериментальной физики связана с весьма высокой степенью наглядности. Например, как отскакивают друг от друга два столкнувшихся атома или две молекулы; как будут отклоняться электрон или альфа-частица, которые пролетают сквозь атом с заданными значениями скорости и момента скорости («перпендикуляра, опущенного из ядра на начальное направление траектории»)? Для того чтобы подойти к сути этих проблем, совершенно необходимо ясно представить себе непрерывный переход между макроскопической наглядной механикой и микромеханикой атомов. Не так давно * я разъяснил, каким этот переход представляется мне. Микромеханика выступает как усовершенствование макромеханики, которое оказывается необходимым вследствие геометрически-механической малости объектов и осуществляется точно таким же образом, как переход от геометрической оптики к физической. Последний необходим, когда длины волн перестают быть очень большими по сравнению с размерами исследуемого объекта или с размерами той области пространства, относительно которой хотят получить точное описание характера распределения света внутри нее.

Мне представляется чрезвычайно трудным делом решать проблемы подобного типа, чувствуя себя обязанным, исходя из теоретико-познавательных предпосылок, бороться с наглядностью в атомной динамике и оперировать исключительно с такими абстрактными понятиями, как вероятности перехода, энергетические уровни и т. п.

Как известно, одним из самых важных вопросов, который, может быть, даже является кардинальным вопросом всей атомной динамики, является вопрос о связи между атомнодинамическими явлениями и электромагнитным полем или тем, что, может быть, должно занять место последнего. Сюда относится не только весь комплекс вопросов о дисперсии, резонансном и вторичном излучении и естественной ширине спектральных линий; само присвоение некоторым атомнодинамическим величинам названий «частота испускания», «интенсивность линий» и т. д. вообще получает какой-то больший, по сравнению с чисто догматическим, смысл только тогда, когда упомянутая связь каким-то образом математически описана. В этом вопросе матричное представление атомной динамики приводило к предположению, что для того чтобы стала возможной математическая формулировка упомянутой выше связи, электромагнитное поле также должно быть представлено иначе, чем обычно, а именно с помощью матриц. Волновая же механика показывает, что эта связь всегда может быть установлена без какого бы то ни было насилия.

Действительно, механическое скалярное поле (обозначенное мною через ψ) вполне пригодно для того, чтобы выступить в роли «источника» векторного электромагнитного поля даже в том случае, когда последнее удовлетворяет неизменным уравнениям Максвелла—Лоренца. Это достигается благодаря трактовке электромагнитных потенциалов как коэффициентов, входящих в волновое уравнение, которое определяет механическое скаляр-

* Ann. Physik, 1926, 79, 489 [9].

ное поле *. Во всяком случае, когда-нибудь стоит попробовать так представить нашу связь, чтобы в неизменные уравнения Максвелла—Лоренца добавлялся в качестве четырехмерного тока некоторый четырехмерный вектор, надлежащим образом полученный из механического скалярного поля ψ , соответствующего движению электрона [11]. Это можно сделать либо с помощью самих векторов поля, либо с помощью потенциалов. Есть даже некоторая надежда на то, что после этого волновое уравнение для ψ точно так же может быть получено в качестве следствия уравнений Максвелла—Лоренца, а именно как уравнение непрерывности электричества.

При этом не следует забывать о трудности, которая в первую очередь связана с многоэлектронной задачей и заключается в том, что ψ является функцией, заданной не в реальном, а в конфигурационном пространстве. Я тем не менее хотел бы несколько подробнее обсудить одноэлектронную задачу, поскольку на этом пути оказывается возможным придать чрезвычайно наглядный смысл интенсивности и поляризации излучения.

Мы рассмотрим волномеханическую картину водородного атома, находящегося в состоянии, для которого механическое скалярное поле ψ задается посредством ряда дискретных собственных функций:

$$\psi = \sum_k c_k u_k(x) e^{\frac{2\pi\sqrt{-1}E_k}{h}} \quad (35)$$

(x обозначает здесь три переменные, например r, θ, φ ; c_k мы считаем действительными; справа нужно взять действительную часть). Предположим теперь, что пространственная плотность электричества задается действительной частью выражения

$$\psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t}. \quad (36)$$

С помощью черты здесь обозначена комплексно-сопряженная величина. Имея это в виду, получаем для пространственной плотности:

Пространственная плотность =

$$= 2\pi \sum_{(k, m)} c_k c_m \frac{E_k - E_m}{h} u_k(x) u_m(x) \sin \frac{2\pi t}{h} (E_m - E_k), \quad (37)$$

* Аналогичные соображения высказывает К. Ланцош (K. Lanczos) в одной недавно появившейся интересной заметке (Z. Phys., 1926, 35, 812), в которой точно так же уже содержится ценное осознание того обстоятельства, что гейзенберговская атомная динамика может быть истолкована и в континуальном духе. Однако в остальных отношениях работа Ланцоша имеет с настоящей работой меньше общего, чем это может показаться на первый взгляд. Определение пока остающейся все еще совершенно неопределенной системы формул Ланцоша нужно искать не в направлении возможности отождествления ланцошевского симметричного ядра $K(s, \sigma)$ с функцией Грина нашего волнового уравнения (21) или (31). Действительно, эта функция Грина (если она существует) имеет в качестве собственных значений сами энергетические уровни. От ланцошевского ядра вместо этого требуется, чтобы его собственными значениями были величины, обратные уровням энергии [10].

где суммирование по каждой комбинации (k, m) осуществляется только один раз [12]. В качестве частот в (37) фигурируют исключительно разности термов. Они настолько малы (niedrig), что соответствующие им длины эфирных волн значительно превышают размеры атома, т. е. размеры той области, внутри которой (37) заметно отлично от нуля *. Вследствие этого излучение можно рассматривать просто как обусловленное дипольным моментом, которым согласно (37) обладает атом в целом. Умножим теперь (37) на одну из декартовых координат q_i и на «весовую функцию» $\rho(x)$ (в данном случае она равна $r^2 \sin \theta$) и проинтегрируем по всему пространству. Согласно (13) для компоненты дипольного момента в направлении q_i будем иметь

$$Mq_i = 2\pi \sum_{(k, m)} c_k c_m q_i^{km} \frac{E_k - E_m}{h} \sin \frac{2\pi t}{h} (E_m - E_k). \quad (38)$$

Фактически это есть «фурье-разложение» электрического момента атома, в котором в качестве частот фигурируют только разности термов. Гейзенберговские матричные элементы q_i^{km} входят в коэффициент этого выражения таким образом, что их влияние на интенсивность и поляризацию соответствующих частей испускаемого излучения полностью может быть понято на основе классической электродинамики.

Только что набросанный эскиз механизма излучения далеко еще не является вполне удовлетворительным и никоим образом не исчерпывает проблемы. Выражение (36), полученное с помощью довольно свободного применения аппарата комплексных чисел, приводит к устранению нежелательных колебательных компонент. Их излучение вообще не может быть выведено простым путем из дипольного момента атома в целом, так как соответствующие им длины эфирных волн (около $0,01 \text{ \AA}$) являются очень малыми по сравнению с размерами атома. Кроме того, пространственная плотность (37), если ее проинтегрировать по всему пространству, оказывается согласно (5) равной нулю, а не конечной, не зависящей от времени величиной, нормированной на заряд электрона, какой она должна быть. Наконец, в дополнение к изложенному выше, следовало бы проделать расчет магнитного излучения, поскольку для пространственного распределения электрического тока возможно также излучение, совершенно не связанное с электрическим моментом, как, например, для рамочной антенны.

Представляется все же вполне правомерным надеяться, что на основе некоторого аналитического механизма, весьма похожего на только что изложенную схему, можно будет достигнуть действительно понимания свойств испускаемого излучения.

Поступило 18 марта 1926 г.

* Ann. Physik, 1926, 79, 371 [13].

КВАНТОВАНИЕ КАК ЗАДАЧА О СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЯХ¹

Третье сообщение *

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ, С ПРИМЕНЕНИЕМ К ШТАРК-ЭФФЕКТУ В ЛИНИЯХ БАЛЬМЕРА

ВВЕДЕНИЕ. ОБЗОР СОДЕРЖАНИЯ

Как уже было указано в конце последнего сообщения **, практически доступная область применения теории собственных значений довольно сильно расширилась за область «непосредственно разрешимых задач». Это было достигнуто при помощи сравнительно элементарных методов. Надо иметь в виду, что собственные значения и собственные функции могут быть найдены приближенным способом для краевых задач, достаточно близких к непосредственно разрешимым проблемам. Мы будем такой подход по аналогии с механикой называть теорией возмущений для задачи собственных значений. Эта теория основана на важном свойстве непрерывности собственных значений и собственных функций ***, причем для нас основную роль играет их непрерывная зависимость от коэффициентов дифференциального уравнения; другая же зависимость, позволяющая расширить область существования решения и краевых условий, играет меньшую роль, так как в нашем случае основная область решения («полное q -пространство») и краевые условия (всюду конечные) в общем совпадают для возмущенной и невозмущенной задачи.

Метод в самом существенном был применен еще в «Theory of sound» лорда Рэля (V. 1, 2th ed. London, 1894, p. 115—118) для того, чтобы исследовать колебания струны с малыми неоднородностями ****. Этот случай особенно простой, так как дифференциальное уравнение невозмущенной задачи имеет постоянные коэффициенты и только возмущающие члены вдоль струны являются произвольными функциями. Полное обобщение возможно не только в этом направлении. Особенно важно обобщение на случай многих независимых переменных, т. е. на дифференциальные уравнения в частных производных, при этом для хорошо известных вопросов спектроскопии (зеeman-эффект, штарк-эффект, мультиплетность) наибольший интерес представляет появление кратных собственных значений в невозмущенной задаче и расщепление такого кратного собственного значения при введении возмущающего члена.

¹ E. Schrödinger. Ann. Physik, 1926, 80, 437. Перевод Н. В. Александровой.

* Ср.: Ann. Physik, 1926, 79, 361, 489; кроме того, там же, с. 734 [с. 8, 21, 56 наст. изд.].

** Ann. Physik, 1926, 79 [с. 49—50 наст. изд.].

*** R. Courant, D. Hilbert. Kap. 6, § 2, 4, S. 337.

**** Ibid., Kap. 5, § 5, 2, S. 241.

Представления теории возмущений я излагаю, прежде всего, в первой части, которая, впрочем, вряд ли даст математикам что-либо новое, ибо в ней меньше внимания уделено достижению возможно большей общности, чем ясному выявлению весьма простых основ. В случае необходимости из них само собой получается желаемое обобщение.

Во второй части в качестве примера применения указанного обобщения рассматривается штарк-эффект, причем это рассмотрение проводится двумя методами. Первый представляет собой обобщение метода Эпштейна, с помощью которого этот исследователь *, исходя из оснований классической механики, дополненной квантовыми условиями, решил впервые задачу штарк-эффекта. Второй метод, более общий, аналог метода вековых возмущений **.

Первый из представленных методов позволяет и здесь, в возмущенной задаче волновой механики, используя параболические координаты, разделить переменные и применить теорию возмущений к уравнениям в полных дифференциалах, на которые распадается исходное уравнение колебания. Последние используются при этом лишь для задач, решаемых в старой теории применением изящного способа комплексного интегрирования Зоммерфельда к приближенному вычислению квантовых интегралов ***.

Второй излагаемый здесь метод позволяет получить для возмущенной задачи в случае штарк-эффекта точную систему координат, в которой переменные разделяются, и применить теорию возмущений прямо к дифференциальным уравнениям в частных производных. Последний способ, хотя и лучше с теоретической точки зрения, потому что более удобен для обобщения, оказывается в волновой механике более трудоемким.

Кое-что сообщается во второй части и о проблеме интенсивности компонент штарк-эффекта; рассчитана картина расщепления, которая, даже взятая в целом, несколько лучше согласуется с опытом, чем хорошо известные расчеты Крамерса ****, основанные на принципе соответствия.

Существенно больший интерес представляет, естественно, применение излагаемых методов (которое здесь еще не приводится) к зеeman-эффекту. Эта проблема кажется мне неразрывно связанной с корректной формулировкой релятивистской задачи на языке волновой механики, поскольку при четырехмерной формулировке появляется вектор-потенциал, который надо рассматривать наряду со скалярными функциями. Уже в первом сообщении отмечалось, что теория релятивистского атома водорода может быть легко построена, но приводит к полужелым азимутальным квантам, т. е. к противоречию с опытом. Следовательно, чего-то «еще недостает». С тех пор я понял из исключительно важной публикации Уленбека и Гаудсмита ***** и из устного (и письменного) сообщения из Парижа (Ланжевен) и Копенгагена

* P. S. Epstein. Ann. Physik, 1916, 50, 489.

** N. Bohr. Kopenhagener Akademie (8), 1918, 4, 69 ff.

*** A. Sommerfeld. Atombau, 4. Aufl., S. 772.

**** H. A. Kramers. Kopenhagener Akademie (8), 1919, 3, 287.

***** G. E. Uhlenbeck, S. Goudsmit. Physica, 1925; Naturwissenschaften, 1926; Nature, 1926, 20, Febr.; L. H. Thomas. Nature, 1926, 10. April.

(В. Паули), чего недостает: на языке теории электронных орбит — вращательного импульса электрона относительно его оси, который создает соответствующий магнитный момент. Мнение названных исследователей вместе с двумя содержательными работами Слетера * и Зоммерфельда и Унзольда ** о бальмеровском спектре не оставляют никаких сомнений в том, что именно введение парадоксального, но удачного понятия собственного импульса электрона позволит теории электронных орбит восторжествовать над устрашающими трудностями, которые накопились в последнее время (аномальный зееман-эффект, пашен — бак-эффект бальмеровских линий, нерегулярные и регулярные рентгеновский дублеты, аналогия последних с дублетами щелочных металлов и т. д.). Необходимо попытаться применить идеи Уленбека—Гаудсмита в волновой механике. Я полагаю, что она представляет собой весьма пригодную питательную среду для этих идей, так как в ней электрон не является более точечным зарядом, но непрерывным потоком заполняет пространство ***, так что устраняется неприятное представление о «вращающейся точечной массе». В лежащем перед Вами сообщении приемлемость этой идеи еще не исследована.

В третьей части в качестве Математического приложения приведено большое число неинтересных расчетов, главным образом квадратур произведений собственных функций, которые необходимы во второй части. Формулы приложения пронумерованы (101), (102) и т. д.

1. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

§ 1. Одна независимая переменная

Рассмотрим некоторое однородное выражение, линейное относительно функции и ее первой и второй производных, которое мы можем взять, не умаляя общности, в самосопряженной форме

$$L[y] = py'' + p'y' - qy, \quad (1)$$

где y — неизвестная функция; p , p' и q — непрерывные функции независимой переменной x , и пусть $p \geq 0$; штрих означает дифференцирование по x (так что p' — производная p ; это есть условие самосопряженности).

Пусть теперь $\rho(x)$ — некоторая другая непрерывная функция, неотрицательная и, вообще говоря, не обращающаяся в нуль. Рассмотрим задачу Штурма—Лиувилля о собственных значениях ****

$$L[y] + E\rho y = 0. \quad (2)$$

* J. C. Slater. Proc. Amer. Nat. Acad., 1926, 11, 732.

** A. Sommerfeld, A. Unsöld. Z. Phys., 1926, 36, 259.

*** Ср.: Ann. Physik, 1926, 79, 755 [с. 73 наст. изд.].

**** Ср.: R. Courant, D. Hilbert. Kap. 5, § 5, 1, S. 238 f.

Она состоит, во-первых, в отыскании всех таких значений константы E («собственных значений»), для которых уравнение (2) имеет решения $y(x)$, непрерывные внутри заданной области, не равные тождественно нулю и удовлетворяющие в граничных точках определенным краевым условиям; и, во-вторых, в нахождении этих решений («собственных функций»). В случаях, рассматриваемых в атомной механике, область, в которой существуют решения, и краевые условия устанавливаются сами: первая, например, есть интервал от 0 до ∞ , если x означает радиус-вектор или некоторую величину той же природы, взятую по положительной параболической координате, а краевые условия должны выражаться конечными величинами. Если x означает азимут, то область решения есть интервал $0—2\pi$, а краевые условия — возвращение к начальным значениям y и y' на концах интервала («периодичность»).

Только в случае выполнения условия периодичности и при одной независимой переменной появляются кратные (а именно двойные) собственные значения; под этим подразумевают, что одному и тому же собственному значению соответствует несколько (в частности, две) линейно независимых собственных функций. Мы хотим сейчас исключить этот случай, так как он в силу его простоты будет легко разрешен в следующих параграфах.

Для упрощения формул не будем включать в расчеты «непрерывный спектр», т. е. континуум собственных значений, который может встречаться в бесконечной области существования решения.

Пусть теперь $y = u_i(x)$, $i = 1, 2, 3, \dots$, — последовательность собственных функций Штурма—Лиувилля; тогда последовательность функций $u_i(x) \sqrt{\rho(x)}$, $i = 1, 2, 3, \dots$ составляет полную ортогональную систему для области решения. Это значит, что если $u_i(x)$ и $u_k(x)$ являются собственными функциями для собственных значений E_i и E_k , то

$$\int \rho(x) u_i(x) u_k(x) dx = 0 \quad \text{для } i \neq k \quad (3)$$

(всюду в этой статье интегралы без обозначения пределов берутся по области существования решения). Определение «полная» означает: некоторая произвольная непрерывная функция, удовлетворяющая требованию ортогональности всем функциям $u_i(x) \sqrt{\rho(x)}$, должна быть тождественно равной нулю. (Короче, кроме тождественного нуля не существует функции, ортогональной всем функциям системы.) Вообще говоря, мы можем (и будем в дальнейшем) считать собственные функции $u_i(x)$ «нормированными». Это означает, что каждая функция умножена на постоянный множитель (который вследствие однородности уравнения (2) произволен), такой, чтобы интеграл (3) принимал значение 1 при $i = k$. И, наконец, напомним еще, что собственные значения (2) — действительные числа.

Пусть теперь собственные значения E_i и собственные функции $u_i(x)$ известны. Будем иметь в виду некоторое определенное собственное значение, скажем E_k , и принадлежащую ему собственную функцию $u_k(x)$ и поставим вопрос, как они изменятся, если, без каких-либо других изменений в за-

даче, в левой части уравнения (2) добавить малый «возмущающий член», который мы пока запишем в форме

$$-\lambda r(x) y. \quad (4)$$

При этом λ — некоторая малая величина (параметр возмущения) $r(x)$ — произвольная непрерывная функция x .

Итак, речь идет просто о незначительном изменении коэффициента q в уравнении (1). Из упоминавшегося во введении свойства непрерывности собственных величин мы знаем, что для измененной таким образом задачи Штурма—Лиувилля

$$L[y] - \lambda r y + E p y = 0 \quad (2')$$

для достаточно малых λ должны существовать собственные значения и собственные функции в некоторой окрестности E_k, u_k . Представим их в виде

$$E_k^* = E_k + \lambda \varepsilon_k; \quad u_k^* = u_k(x) + \lambda v_k(x). \quad (5)$$

Подставим эти суммы в уравнение (2). Тогда, принимая во внимание, что u_k удовлетворяет уравнению (2), пренебрегая всюду членом λ^2 и сократив множитель λ , получаем

$$L[v_k] + E_k \rho v_k = (r - \varepsilon_k \rho) u_k. \quad (6)$$

Итак, из сравнения уравнений (2) и (6) мы получаем для определения возмущенной собственной функции v_k некоторое неоднородное уравнение, соответствующее такому однородному уравнению, которому удовлетворяет невозмущенная собственная функция u_k . (В уравнении (6) вместо E стоит частное собственное значение E_k .) В правую часть этого неоднородного уравнения, кроме известных величин, входит также неизвестное возмущение ε_k собственного значения.

Благодаря этому можно вычислить ε_k еще до вычисления v_k . Известно (и это теперь основной отправной пункт всей теории возмущения), что неоднородное уравнение для некоторого собственного значения однородного уравнения, вообще говоря, имеет тогда и только тогда решение, когда его правая часть ортогональна соответствующей собственной функции (а в случае кратных собственных значений — ортогональна всем собственным функциям, принадлежащим данному собственному значению)*. (В качестве физической интерпретации можно рассмотреть колебание струны; тогда эта математическая теорема означает следующее. Если сила находится в резонансе с собственным колебанием, она должна быть распределена по струне совершенно особым образом, а именно так, чтобы не производилось никакой работы на указанном собственном колебании; иначе амплитуда превысит все границы, и стационарное состояние станет невозможным.)

* Ср.: R. Courant, D. Hilbert. Kap. 5, § 10, 2, S. 277.

Правая часть уравнения (6) должна быть также ортогональной u_k , т. е. должно выполняться

$$\int (r - \varepsilon_k \rho) u_k^2 dx = 0, \quad (7)$$

или

$$\varepsilon_k = \frac{\int r u_k^2 dx}{\int \rho u_k^2 dx}, \quad (7')$$

или еще проще, если u_i предполагаются нормированными,

$$\varepsilon_k = \int r u_k^2 dx. \quad (7'')$$

Эта простая формула выражает возмущения (первого порядка) собственных значений через функцию возмущения $r(x)$ и через невозмущенную собственную функцию $u_k(x)$. Если полагать, что в нашей задаче собственное значение представляет собой механическую энергию или может быть ей сопоставлено и что собственная функция u_k может быть сопоставлена «движению с энергией E_k » то выражение (7'') представляет собой полный аналог хорошо известной теоремы теории возмущений классической механики: возмущение энергии в первом приближении равно возмущающей функции, усредненной по невозмущенному движению.

Сделаем еще замечание формального характера: по смыслу или, по крайней мере, по эстетическим соображениям в подынтегральные выражения всех интегралов, распространенных на область решения уравнений, в явном виде должен входить множитель $\rho(x)$. Это желательно сделать также в интеграле (7''). Тогда в качестве возмущающей функции появится не $r(x)$, а $r(x)/\rho(x)$, и соответственно этому запишется исходное выражение (4). Однако это для дальнейшего несущественно, и мы не будем менять введенных ранее обозначений.

Мы должны еще из (6) определить $v_k(x)$ — возмущение собственной функции. Неоднородное уравнение (6) решается подстановкой вместо v_k его разложения в ряд по собственным функциям

$$v_k(x) = \sum_{i=1}^{\infty} \gamma_{ki} u_i(x). \quad (8)$$

Правую часть, разделенную на $\rho(x)$, тоже разлагаем в ряд по собственным функциям

$$\left(\frac{r(x)}{\rho(x)} - \varepsilon_k \right) u_k(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_{ki} u_i(x), \quad (9)$$

где вследствие (7)

$$\begin{aligned} c_{ki} &= \int (r - \varepsilon_k \rho) u_k u_i dx = \\ &= \int r u_k u_i dx \quad \text{для } i \neq k, \\ &= 0 \quad \text{для } i = k. \end{aligned} \quad (10)$$

Подставив (8) и (9) в (6), приходим к уравнению

$$\sum_{i=1}^{\infty} \gamma_{ki} (L[u_i] + E_k \rho u_i) = \sum_{i=1}^{\infty} c_{ki} \rho u_i. \quad (11)$$

Так как теперь u_i удовлетворяют уравнению (2) при $E = E_i$, то получаем

$$\sum_{i=1}^{\infty} \gamma_{ki} \rho (E_k - E_i) u_i = \sum_{i=1}^{\infty} c_{ki} \rho u_i. \quad (12)$$

Приравниванием коэффициентов справа и слева определяем все коэффициенты γ_{ki} , кроме γ_{kk} . Получаем

$$\gamma_{ki} = \frac{c_{ki}}{E_k - E_i} = \frac{\int r u_k u_i dx}{E_k - E_i} \quad \text{для } i \neq k, \quad (13)$$

в то время как γ_{kk} , разумеется, остаются неопределенными.

Эта неопределенность соответствует тому факту, что мы распространяем требования нормирования на возмущенные собственные функции. Подставим разложение (8) в выражение (5) и потребуем для $u_k^*(x)$ выполнения той же самой нормировки, что и для $u_k(x)$ (при этом величинами порядка λ^2 пренебрегаем); тогда непосредственно получаем $\gamma_{kk} = 0$. Учитывая выражение (13), получаем возмущенные собственные функции

$$u_k^*(x) = u_k(x) + \lambda \sum_{i=1}^{\infty} \frac{u_i(x) \int r u_k u_i dx}{E_k - E_i}. \quad (14)$$

(Штрих у знака суммы означает, что член $i=k$ опущен.) Соответствующее возмущенное собственное значение будет согласно предыдущему

$$E_k^* = E_k + \lambda \int r u_k^2 dx. \quad (15)$$

Подстановкой в (2) можно убедиться, что значения (14) и (15) действительно удовлетворяют задаче собственных значений в желательном приближении. Эта проверка необходима, так как разложение по целым степеням параметра возмущения, подставляемое в (5), не является необходимым следствием непрерывности.

Метод, изложенный здесь достаточно подробно для простейшего случая, допускает обобщение. Его можно распространить совершенно аналогичным образом на случай возмущений второго, третьего и т. д. порядка по λ , причем всегда, взяв сначала ближайшее точное собственное значение, найдем затем ближайшую собственную функцию. В зависимости от условий задачи при этом нужно — совсем как в теории возмущений механики — рассматривать саму возмущающую функцию в виде степенного ряда по степеням λ , члены которого вступают в игру один за другим на отдельных этапах. Эти

вопросы обсуждались Е. Фюсом в работе, появившейся одновременно, в связи с применениями к теории полосатых спектров [1].

Совершенно таким же образом, каким было выше рассмотрено возмущение члена — qu , входящего в дифференциальный оператор (1), можно рассмотреть также возмущение члена с y' . Это важный случай, так как возмущение такого вида приводит к зееман-эффекту (естественно, что при этом возникает уравнение с несколькими независимыми переменными).

При этом из-за возмущения уравнение теряет свою самосопряженную форму, что в случае одной переменной не очень существенно. Однако в уравнении с частными производными эта потеря может привести к тому, что при действительном возмущающем члене возмущенные собственные значения не окажутся более действительными; и, естественно, наоборот: мнимый возмущающий член вызывает действительное возмущение, имеющее ясный физический смысл.

Можно пойти еще дальше и рассмотреть возмущение члена с y'' . Да ничто не мешает, наконец, добавить в качестве возмущающего члена совершенно общий «бесконечно малый» линейный * и однородный дифференциальный оператор более высокого порядка, а затем рассматривать возмущение совершенно так же, как выше. При этом будет использовано то преимущество, что вторая производная и производные более высоких порядков собственных функций дифференциального уравнения могут быть выражены через первые производные и сами функции. Этот общий случай как бы сводится к двум рассмотренным прежде частным случаям: возмущение членов, содержащих y и y' .

Наконец, очевидно, возможен также перенос рассмотренного метода на уравнения более высоких порядков, чем второй.

Несомненно, важнейшее обобщение — это обобщение на случай многих независимых переменных, т. е. на случай дифференциальных уравнений в частных производных. Проблема тогда формулируется в самом общем виде; но только в исключительных случаях возмущенное дифференциальное уравнение в частных производных при введении подходящих переменных распадается на отдельные обыкновенные дифференциальные уравнения.

§ 2. Случай нескольких независимых переменных (дифференциальное уравнение в частных производных)

Введем для краткости символическую запись в формулах, а именно: несколько независимых переменных обозначим одним знаком и будем записывать $\int dx$ (вместо $\int \dots \int dx_1 dx_2 \dots$) для интеграла, взятого по многомерной области существования решений. Такой способ записи известен из теории интегральных уравнений и имеет здесь, как и там, то преимуще-

* Само ограничение «линейный» не является безусловно необходимым.

щество, что вид математических выражений меняется не за счет возрастающего числа однотипных переменных, а только за счет существенно новых явлений, что и находит выражение в изменении числа переменных.

Итак, пусть $L[y]$ означает самосопряженное линейное выражение с частными производными второго порядка, явную форму которого мы не выписываем; кроме того, пусть $\rho(x)$ — некоторая, вообще говоря, отличная от нуля положительная функция многих независимых переменных. Предположение «самосопряженности» не будет теперь несущественным, потому что в общем случае нельзя умножением этой функции на $f(x)$, выбранную подходящим образом, свести задачу к одной переменной.

В частном случае дифференциальных выражений волновой механики это, однако, имеет место, потому что они возникают из некоторого вариационного принципа.

Исходя из этих предпосылок, мы можем рассматривать уравнение (2) § 1

$$L[y] + E\rho y = 0 \quad (2)$$

как формулировку проблемы собственных значений Штурма—Лиувилля также и в случае многих переменных.

Все сказанное ранее о собственных значениях и собственных функциях, об их ортогональности, нормировании и т. д. и вся развитая теория возмущения, короче говоря, весь § 1 остается неизменным при введенных предположениях о сокращенном способе обозначения в том случае, если все собственные значения простые. И только одно нельзя утверждать для рассматриваемого случая многих переменных: что собственные значения должны быть простыми (однократными).

Тем не менее, исходя из чисто математических соображений, однократность собственных значений и в случае многих переменных должна рассматриваться как общий случай, а кратность — как специальный. В силу простого и симметричного вида встречающихся в приложениях дифференциальных выражений $L[y]$ (и «краевых условий») это обычно имеет место. Кратность собственных значений соответствует вырождению в теории условно периодической системы и представляет для квантовой теории особый интерес.

Собственное значение E_k называется α -кратным, если уравнение (2) для $E = E_k$ имеет не одно, а точно α линейно независимых решений, которые удовлетворяют краевым условиям. Обозначим их

$$u_{k1}, u_{k2}, \dots, u_{k\alpha}. \quad (16)$$

Тогда каждая из этих α собственных функций ортогональна любой другой собственной функции, принадлежащей другому собственному значению (если ввести множитель $\rho(x)$, ср. (3)). Наоборот, если относительно α функций (16) не предполагается ничего, кроме того, что они представляют собой линейно независимые собственные функции собственного значения E_k , то, вообще говоря, свойство взаимной ортогональности для них не имеет места.

Тогда с таким же правом можно взять вместо них любые α линейно независимые комбинации из них самих (с постоянными коэффициентами). Иными словами: система функций (16) определена с точностью до линейного преобразования (с постоянными коэффициентами) с детерминантом, отличным от нуля, а такое преобразование, вообще говоря, нарушает взаимную ортогональность.

Взаимную ортогональность можно получить посредством линейного преобразования, а также бесконечным числом других способов. Из этого следует, что некоторое ортогональное преобразование не нарушает взаимной ортогональности.

Обычно при нормировании считают, что для всех собственных функций, относящихся к одному и тому же собственному значению, ортогональность уже введена. Будем считать u_{ki} уже нормированными таким образом и, естественно, для каждого собственного значения. Тогда

$$\begin{aligned} \int \rho(x) u_{ki}(x) u_{k'i'}(x) dx &= 0 & \text{при } k, i \neq k', i', \\ &= 1 & \text{при } k = k', i = i'. \end{aligned} \quad (17)$$

Каждая собственная функция из конечной системы u_{ki} (при постоянном k и изменяющемся i) определена с точностью до ортогонального преобразования.

Обсудим теперь изменения, которые вызывает добавление возмущающего члена в дифференциальное уравнение (2), сначала не используя математический аппарат. Добавление возмущающего члена нарушит упомянутую выше симметрию дифференциального уравнения, которая вытекает из кратности собственных значений. Так как собственные значения и собственные функции непрерывно зависят от коэффициентов дифференциального уравнения, то при малом возмущении вместо α -кратного E_k появится группа из α собственных значений, близких друг к другу и к E_k ; α -кратное собственное значение расщепляется. Естественно, может случиться (если возмущение не полностью уничтожает симметрию и расщепление не является полным), что вместо E_k появляются собственные значения, сумма которых равна их кратности («частичное снятие вырождения»).

Что касается возмущенных собственных функций, то вследствие непрерывности та их часть, которая принадлежит к α собственным значениям, возникающим из собственных значений E_k , должна лежать бесконечно близко к невозмущенным собственным функциям u_{ki} , $i=1, 2, \dots, \alpha$, принадлежащим к E_k . При этом следует считать, что упомянутый ряд функций определен с точностью до некоторого произвольного ортогонального преобразования. Тогда можно представить ряд по собственным функциям u_{ki} , $i=1, \dots, \alpha$, так, чтобы он лежал бесконечно близко к системе возмущенных функций. А именно, когда собственное значение E_k полностью расщепляется, ряд точно определен! Ибо отдельным простым собственным значениям, на которые оно расщепляется, принадлежат однозначно определенные собственные функции.

Это возникающее из самого характера таких возмущений специальное однозначно установленное значение невозмущенных собственных функций должно быть по своему смыслу принято за «нулевое приближение» для возмущенных собственных функций; оно не совпадает, вообще говоря, со значением невозмущенных собственных функций и более или менее случайно введено нами вначале. Каждая группа невозмущенных собственных функций, принадлежащая α -кратному собственному значению E_k , должна в зависимости от вида возмущения удовлетворять некоторой ортогональной подстановке. Только когда это имеет место, она может быть принята в качестве «нулевого приближения» для более точного нахождения возмущенных собственных функций. Отыскание этой ортогональной подстановки для каждого кратного собственного значения является единственным существенно новым моментом, который возникает благодаря увеличению числа переменных и, соответственно, появлению кратных собственных значений. Определение этих подстановок в точности подобно нахождению приближенной системы разделяющихся переменных для возмущенного движения в теории условно периодических систем. Как мы далее увидим, возможно просто найти подстановки. Требуется только для каждого α -кратного собственного значения привести к главным осям координат некоторую квадратичную форму α переменных (т. е. форму конечного числа переменных).

Раз подстановка найдена, вычисление первого приближения протекает почти точно, как в § 1. Единственное различие состоит в том, что штриху у знака суммы в уравнении (14) нужно придать следующее значение: при суммировании должны отсутствовать все собственные функции, принадлежащие собственным значениям E_k , т. е. все члены, знаменатели которых обращаются в нуль. При этом можно заметить, что для первого приближения совершенно не нужны упоминавшиеся ортогональные подстановки; полученные для всех кратных собственных значений, а достаточно найти их для того собственного значения E_k , расщепление которого представляет интерес. Для приближений более высоких порядков все они необходимы. Впрочем, эти более высокие приближения получаются точно так же, как при простых рассмотренных выше собственных значениях.

Само собой разумеется, как упоминалось выше, может случиться, что собственное значение E_k либо вообще, либо в начальных приближениях не полностью расщепляется, но кратность («вырождение») еще сохраняется. Это выражается в том, что упоминавшиеся выше подстановки еще сохраняют некоторую неопределенность, которая либо остается неизменной, либо при дальнейших приближениях постепенно исчезает.

Выразим изложенное аналитически. Рассмотрим, как и раньше, член

$$-\lambda r(x)y, \quad (4)$$

определяющий возмущение, т. е. полагаем, что проблема собственных значений, выраженная уравнением (2), разрешена, и рассматриваем соответствующую ей возмущенную задачу (2')

$$L[y] - \lambda ry + Epy = 0. \quad (2')$$

Обратимся опять к определенному собственному значению E_k . Пусть (16) есть принадлежащая ему система собственных функций, которую мы считаем нормированной и ортогональной в изложенном выше смысле. Однако эта система еще не приведена в соответствие с частным видом возмущения (в том же смысле), так как подстановку, которая приводит к этому, еще надо найти, что и является, собственно говоря, нашей главной задачей!

Вместо соотношения (5) мы должны записать для возмущенных величин следующее:

$$E_{kl}^* = E_k + \lambda \varepsilon_l, \quad u_{kl}^*(x) = \sum_{i=1}^{\alpha} \kappa_{li} u_{ki}(x) + \lambda v_l(x) \quad (l=1, 2, \dots, \alpha), \quad (18)$$

где $v_l(x)$ — определяемые функции, ε_l и κ_{li} — искомые постоянные системы, на которые мы вначале не накладываем никакие ограничения, даже если знаем, что система коэффициентов κ_{li} должна образовать ортогональную подстановку *. Следовало бы отметить индексом k указанные три вида величин для того, чтобы указать, что все рассуждения относятся непосредственно к k -му собственному значению невозмущенной задачи. Опустим эти индексы ради сокращения записи. В дальнейших рассмотрениях индекс k остается фиксированным, пока противное не будет специально оговорено.

Возьмем теперь одну из возмущенных собственных функций и одно из собственных значений, придав индексу l в формулах (18) определенное значение. Затем подставим выражения (18) в дифференциальное уравнение (2') и расположим члены по степеням λ . Тогда так же, как и в § 1, исчезают члены, не зависящие от λ , так как возмущенные собственные величины по предположению удовлетворяют уравнению (2). Остаются только члены с первыми степенями λ , так как второй степенью мы можем пренебречь. Опуская множитель λ , получаем

$$L[v_l] + E_k \rho v_l = \sum_{i=1}^{\alpha} \kappa_{li} (r - \varepsilon_l \rho) u_{ki}. \quad (19)$$

Итак, мы снова получаем для определения возмущенных собственных функций v_l неоднородное уравнение. Для него однородным является снова уравнение (2) с частным значением $E = E_k$. Именно этому однородному уравнению удовлетворяют все u_{ki} , $i=1, 2, \dots, \alpha$. Вид левой части уравнения (19) не зависит от индекса l .

В правую часть входят константы ε_l и κ_{li} , подлежащие определению, и поэтому их можно вычислить отсюда еще до вычисления v_l . Для того чтобы уравнение (19) вообще имело решение, необходимо и достаточно, чтобы его правая часть была ортогональной всем собственным функциям уравнения (2), принадлежащим к E_k .

* То, что система возмущенных функций $u_{kl}^*(x)$ должна быть ортогональной, если возмущение полностью снимает вырождение, и может считаться таковой даже в случае, если этого нет, следует из общей теории.

Итак, должно быть

$$\sum_{i=1}^{\alpha} x_{li} \int (r - \varepsilon_l) u_{ki} u_{km} dx = 0, \quad m = 1, 2, \dots, \alpha, \quad (20)$$

т. е. из-за нормирования (17)

$$x_{lm} \varepsilon_l = \sum_{i=1}^{\alpha} x_{li} \int r u_{ki} u_{km} dx, \quad m = 1, 2, \dots, \alpha. \quad (21)$$

Запишем для краткости симметричную матрицу констант, получающихся квадратурами,

$$\int r u_{ki} u_{km} dx = \varepsilon_{im}, \quad i, m = 1, 2, \dots, \alpha. \quad (22)$$

Тогда находим из

$$x_{lm} \varepsilon_l = \sum_{i=1}^{\alpha} x_{li} \varepsilon_{mi}, \quad m = 1, 2, \dots, \alpha \quad (21')$$

систему α линейных однородных уравнений для вычисления α констант x_{lm} , $m = 1, 2, \dots, \alpha$, куда, во всяком случае в коэффициенты входит еще неизвестное возмущенное собственное значение ε_l . Одно это обстоятельство позволяет вычислить ε_l еще до определения x_{lm} .

Известно, что система линейных однородных уравнений (21') тогда и только тогда имеет ненулевые решения, когда ее детерминант обращается в нуль. Это требование дает следующее алгебраическое уравнение степени α относительно ε_l :

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_{11} - \varepsilon_l & \varepsilon_{12} & \dots & \varepsilon_{1\alpha} \\ \varepsilon_{21} & \varepsilon_{22} - \varepsilon_l & \dots & \varepsilon_{2\alpha} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varepsilon_{\alpha 1} & \varepsilon_{\alpha 2} & \dots & \varepsilon_{\alpha\alpha} - \varepsilon_l \end{vmatrix} = 0. \quad (23)$$

Эта задача совершенно тождественна приведению квадратичной формы α переменных с коэффициентами ε_{mi} к ее главным осям. «Вековое уравнение» (23) определяет в общем случае α разных и из-за симметрии ε_{mi} всегда действительных корней для ε_l — «обратные квадраты главных осей». Мы получаем таким образом одновременно все α возмущенных собственных значений ($l = 1, 2, \dots, \alpha$), и должно было бы иметь место расщепление α -кратного собственного значения на α , в общем случае различных, простых собственных значений, даже если бы мы заранее не предположили этого как само собой разумеющегося. Для каждого данного значения ε_l уравнения (21') дают систему величин x_{li} , $i = 1, 2, \dots, \alpha$ (с точностью до постоянного общего множителя), причем, как известно, только одну такую, для которой все ε_l действительно различны. Далее известно, что вся система α^2 величин x_{li} образует ортогональную систему коэффициентов, так как она, как обычно в задаче главных осей, определяет направления новых осей координат в старой системе. Только что упомянутые неопределенные множители мы можем

использовать для нормирования, чтобы полностью превратить x_{li} в «направляющие косинусы». Благодаря этому легко убедиться, что уже в нулевом приближении (т. е. с точностью до членов, содержащих множитель λ) возмущенные собственные функции $u_{ki}^*(x)$ согласно (18) выпадают при нормировании.

Пусть уравнение (23) имеет кратные корни, тогда мы имеем рассмотренный случай: возмущение не устраняет полностью вырождения. Возмущенное уравнение имеет также кратные собственные значения, и определение констант x_{li} частично произвольно. Отсюда вытекает единственное следствие: при кратных собственных значениях система собственных функций в некотором смысле произвольна. С приведением к главным осям решена основная задача, и очень часто в квантовомеханических приложениях обходятся первым приближением собственных значений и нулевым приближением собственных функций. Вычислить константы x_{li} и ε_l , естественно, в общем случае нельзя, так как это вычисление связано с решением алгебраического уравнения степени α . В худшем случае имеются рациональные методы, с помощью которых можно получить произвольное приближение*. Итак, мы можем считать эти константы известными и лишь для полноты вычислить еще собственные функции в первом приближении. Впрочем, это вычисление точно такое же, как в § 1.

Нужно решить уравнение (19); для этого представим v_l рядом по всем собственным функциям уравнения (2)

$$v_l(x) = \sum_{(k', i')} \gamma_{l, k', i'} u_{k' i'}(x). \quad (24)$$

Суммировать следует по k' от 0 до ∞ и при каждом фиксированном k' , по i' — по конечному числу собственных функций, принадлежащих $E_{k'}$. (Здесь появляются впервые и такие собственные функции, которые не относятся к упомянутым выше α -кратным собственным значениям E_k .)

Разложим теперь правую часть уравнения (19), разделенную на $\rho(x)$, в ряд по всем собственным функциям

$$\sum_{i=1}^{\alpha} x_{li} \left(\frac{r}{\rho} - \varepsilon_l \right) u_{ki} = \sum_{(k', i')} c_{l, k', i'} u_{k' i'}, \quad (25)$$

причем

$$\begin{aligned} c_{l, k', i'} &= \sum_{i=1}^{\alpha} x_{li} \int (r - \varepsilon_l \rho) u_{ki} u_{k' i'} dx = \\ &= \sum_{i=1}^{\alpha} x_{li} \int r u_{ki} u_{k' i'} dx \quad \text{для } k' \neq k, \\ &= 0 \quad \text{для } k' = k. \end{aligned} \quad (26)$$

(Оба последних равенства вытекают из (17) и (20).)

* R. Courant, D. Hilbert, Kap. 1, § 3, 3, S. 14.

Если подставить (24) и (25) в (19), то получим

$$\sum_{(k'l')} \gamma_{l, k'i'} (L[u_{k'i'}] + E_k \rho u_{k'i'}) = \sum_{(k'i')} c_{l, k'i'} \rho u_{k'i'}. \quad (27)$$

Так как $u_{k'i'}$ удовлетворяет уравнению (2) при $E = E_{k'}$, то имеют место соотношения

$$\sum_{(k'i')} \gamma_{l, k'i'} (E - E_{k'}) u_{k'i'} = \sum_{k'i'} c_{l, k'i'} \rho u_{k'i'}. \quad (28)$$

Сравнивая коэффициенты справа и слева, определим все $\gamma_{l, k'i'}$ за исключением тех, для которых $k' = k$, т. е.

$$\gamma_{l, k'i'} = \frac{c_{l, k'i'}}{E_k - E_{k'}} = \frac{1}{E_k - E_{k'}} \sum_{i=1}^{\alpha} x_{li} \int r u_{ki} u_{k'i'} dx \quad \text{для } k' \neq k. \quad (29)$$

Это соответствует тому, что мы нормировали возмущенные собственные функции u_{kl}^* (18) пока что в нулевом приближении (посредством нормирования x_{li}). Легко видеть, что все γ -величины следует положить равными нулю, чтобы провести нормирование u_{kl}^* также и в первом приближении. Подстановкой (29) в (24), а затем (24) в (18) получается, наконец, для возмущенных собственных функций в первом приближении

$$u_{kl}^*(x) = \sum_{i=1}^{\alpha} x_{li} \left[u_{ki}(x) + \lambda \sum_{k'i'}' \frac{u_{k'i'}}{E_k - E_{k'}} \int r u_{ki} u_{k'i'} dx \right], \quad (30)$$

$i = 1, 2, \dots, \alpha.$

Штрих во втором знаке суммирования указывает, что все члены с $k' = k$ следует опустить. При применении этой формулы для любых k существенно, что x_{li} и α -кратность собственного значения E_k все еще зависят от индекса k . Это не отражено в наших обозначениях. Величины x_{li} следует вычислять как сумму квадратов нормированных на единицу систем решений уравнений (21'), коэффициенты которых заданы (22), в то время как для величины ε_l в (21') следует взять один из корней уравнения (23). Этот корень дает соответствующее возмущенное собственное значение

$$E_{kl}^* = E_k + \lambda \varepsilon_l. \quad (31)$$

Формулы (30) и (31) представляют собой обобщение формул (14) и (15) § 1.

Едва ли нужно говорить о том, что здесь вполне естественно опять имеют место упомянутые в конце § 1 расширения и обобщения. Не стоит приводить результаты в общем виде. В частных случаях лучше всего не пользоваться готовыми формулами, а исходить прямо из простых основ теории, которые очень подробно изложены выше. Рассуждения в конце § 1 могут быть сокращены — уравнение (2), возможно, перестает быть самосопряженным, причем при наличии многих переменных возможно, что это происходит безвозвратно, если возмущающие члены содержат производные неиз-

вестной функции. По общим соображениям в этом случае собственные значения возмущенного уравнения не обязательно действительны. Мы можем объяснить это подробнее. Просматривая рассуждения этого параграфа, нетрудно заметить, что если возмущенные члены содержат производные, то детерминант (23) больше не симметричен. Известно, что в этом случае корни уравнения (23) не обязательно действительны.

То обстоятельство, что необходимо использовать разложения известных функций в ряды по собственным функциям (чтобы исходить из первого или, соответственно, из нулевого приближения собственных значений, соответственно, собственных функций), может оказаться довольно неудобным и значительно усложнить вычисления в тех случаях, когда наряду с точечным спектром встречается также и непрерывный спектр, а в точечном спектре на конечном отрезке имеются точки сгущения. Как раз такой случай встречается в проблемах, возникающих в квантовой теории. К счастью, иногда — может быть даже всегда — бывает возможно для целей теории возмущений освободиться от докучного непрерывного спектра и свести теорию возмущений к одному уравнению, которое не имеет непрерывного спектра и собственные значения которого не имеют точки сгущения на конечном интервале, а с ростом индекса неограниченно возрастают. В следующем параграфе мы познакомимся с таким примером. Само собой разумеется, что такое облегчение будет только тогда, когда исследование собственных значений этого непрерывного спектра не представляет непосредственного интереса.

II. ПРИМЕНЕНИЕ К ШТАРК-ЭФФЕКТУ

§ 3. Вычисление частот методом, соответствующим методу Эпштейна [2]

Для того чтобы получить волновое уравнение штарк-эффекта атома водорода, нужно прибавить к уравнению (5) с. 9 (волновому уравнению задачи Кеплера) потенциальную энергию $+eFz$, которая соответствует действию электрического поля силы F на отрицательный электрон с электрическим зарядом e в положительном направлении оси z . Мы получаем уравнение

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2m}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{r} - eFz\right)\psi = 0, \quad (32)$$

которое является основой последующего изложения. В § 5 мы применим к этому дифференциальному уравнению в частных производных общую теорию возмущений § 2. Наша задача облегчается, если ввести пространственные параболические координаты λ_1 , λ_2 , φ следующими равенствами:

$$x = \sqrt{\lambda_1\lambda_2} \cos \varphi, \quad y = \sqrt{\lambda_1\lambda_2} \sin \varphi, \quad z = \frac{1}{2}(\lambda_1 - \lambda_2), \quad (33)$$

где λ_1 и λ_2 изменяются от 0 до ∞ .

Координатными поверхностями при этом являются два семейства конфокальных параболоидов вращения, фокусы которых совпадают с началом координат, а положительное направление λ_2 , соответственно, отрицательное направление λ_1 , — с осью z . Переменная φ изменяется от 0 до 2π ; координатными поверхностями являются семейства полуплоскостей, ограниченных осью z . Введением такой системы координат каждая точка определяется однозначно. Для функционального детерминанта получаем

$$\frac{\partial(x, y, z)}{\partial(\lambda_1, \lambda_2, \varphi)} = \frac{1}{4}(\lambda_1 + \lambda_2). \quad (34)$$

Таким образом, элемент объема имеет вид

$$dx dy dz = \frac{1}{4}(\lambda_1 + \lambda_2) d\lambda_1 d\lambda_2 d\varphi. \quad (35)$$

Отметим еще как следствие формул (33):

$$x^2 + y^2 = \lambda_1 \lambda_2, \quad r^2 = x^2 + y^2 + z^2 = \frac{1}{2}(\lambda_1 + \lambda_2). \quad (36)$$

Преобразование уравнения (32) к выбранным координатам дает, если умножить его на (34) (для приведения к самосопряженной форме) *,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda_1} \left(\lambda_1 \frac{\partial \psi}{\partial \lambda_1} \right) + \frac{\partial}{\partial \lambda_2} \left(\lambda_2 \frac{\partial \psi}{\partial \lambda_2} \right) + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{\lambda_1} + \frac{1}{\lambda_2} \right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \\ + \frac{2\pi^2 m}{h^2} \left[E(\lambda_1 + \lambda_2) + 2e^2 - \frac{1}{2} eF(\lambda_1^2 - \lambda_2^2) \right] \psi = 0. \end{aligned} \quad (32')$$

Здесь можно функцию ψ представить как произведение трех функций, каждая из которых зависит от одной переменной (что является основой всех «методов» решения линейных дифференциальных уравнений в частных производных)

$$\psi = \Lambda_1 \Lambda_2 \Phi. \quad (37)$$

Для этих функций получим обыкновенные дифференциальные уравнения:

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = -n^2 \Phi,$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \lambda_1} \left(\lambda_1 \frac{\partial \Lambda_1}{\partial \lambda_1} \right) + \frac{2\pi^2 m}{h^2} \left(-\frac{1}{2} eF\lambda_1^2 + E\lambda_1 + e^2 - \beta - \frac{n^2 h^2}{8\pi^2 m} \frac{1}{\lambda_1} \right) \Lambda_1 = 0, \\ \frac{\partial}{\partial \lambda_2} \left(\lambda_2 \frac{\partial \Lambda_2}{\partial \lambda_2} \right) + \frac{2\pi^2 m}{h^2} \left(\frac{1}{2} eF\lambda_2^2 + E\lambda_2 + e^2 + \beta - \frac{n^2 h^2}{8\pi^2 m} \frac{1}{\lambda_2} \right) \Lambda_2 = 0, \end{aligned} \quad (38)$$

в которых n и β представляют две подлежащие определению «подобные

* Самые простые расчеты по (32'), так же как вообще при решении волнового уравнения в некоторой специальной системе координат, можно провести, решая не само уравнение, а соответствующую ему вариационную задачу (см. первое сообщение, с. 19—20). Волновое уравнение получается тогда как вариационное уравнение Эйлера. Таким образом мы избегаем трудоемких вычислений вторых производных. Ср.: *R. Courant, D. Hilbert*. Кар. 4, § 7, S. 193.

собственным значениям» постоянные интегрирования (наряду с E). При выборе обозначения для первой величины мы уже отмечали, что в силу первого из уравнений (38) она принимает только целочисленные значения, если Φ и $\partial\Phi/\partial\varphi$ являются однозначными и непрерывными функциями азимута φ . Тогда получаем

$$\Phi = \frac{\sin}{\cos} n\varphi \quad (39)$$

и достаточно рассмотреть только неотрицательные значения n

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (40)$$

В обозначении второй константы β мы будем следовать Зоммерфельду («Atombau», 4 Aufl., S. 821), чтобы несколько облегчить сравнение (так же, как далее и с величинами A, B, C, D). Два последних уравнения (38) будем рассматривать в совокупности в форме

$$\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial\Lambda}{\partial\xi}\right) + \left(D\xi^2 + A\xi + 2B + \frac{C}{\xi}\right)\Lambda = 0, \quad (41)$$

при этом

$$\left. \begin{matrix} D_1 \\ D_2 \end{matrix} \right\} = \mp \frac{\pi^2 m e F}{h^2}, \quad A = \frac{2\pi^2 m E}{h^2}, \quad \left. \begin{matrix} B_1 \\ B_2 \end{matrix} \right\} = \frac{\pi^2 m}{h^2} (e^2 \mp \beta), \quad C = -\frac{n^2}{4}. \quad (42)$$

Верхний знак соответствует $\Lambda = \Lambda_1$, $\xi = \lambda_1$, а нижний — $\Lambda = \Lambda_2$, $\xi = \lambda_2$ (к сожалению, мы вынуждены писать ξ вместо обычного λ из-за коллизии с параметром возмущения общей теории § 1 и 2).

Отбросим прежде всего в (41) $D\xi^2$ — член, соответствующий штарк-эффекту, который мы принимаем за возмущающий член (предельный случай отсутствия поля). В таком случае это уравнение имеет точно такую же структуру, как уравнение (7) первого сообщения (с. 10), причем и область решения та же: от 0 до ∞ . Обсуждение этих случаев почти буквально совпадает, и поэтому в области существования решения не равно тождественно нулю, непрерывное и конечное вместе со своими производными решение существует тогда и только тогда, когда или $A > 0$ (непрерывный спектр, соответствующий гиперболическим орбитам), или

$$\frac{B}{\sqrt{-A}} - \sqrt{-C} = k + \frac{1}{2}, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (43)$$

Если применить это к двум последним уравнениям (38) и различать два значения k индексами 1 и 2, то получим

$$\begin{aligned} \sqrt{-A} \left(k_1 + \frac{1}{2} + \sqrt{-C} \right) &= B_1, \\ \sqrt{-A} \left(k_2 + \frac{1}{2} + \sqrt{-C} \right) &= B_2. \end{aligned} \quad (44)$$

Сложением и квадратурой, принимая во внимание выражение (42), получим

$$A = -\frac{4\pi^4 m^2 e^4}{h^4 l^2}, \quad E = -\frac{2\pi^2 m e^4}{h^2 l^2}. \quad (45)$$

Это хорошо известные эллипсы уровней Бальмера—Бора, при этом главное квантовое число равно

$$l = k_1 + k_2 + n + 1. \quad (46)$$

Дискретный спектр термов и соответствующие собственные функции получаются проще, если использовать уже известные результаты, имеющиеся в математической литературе. А именно преобразуем зависимую переменную Λ в (41) следующим образом:

$$\Lambda = \xi^{\frac{n}{2}} u, \quad (47)$$

а независимую переменную ξ так:

$$2\xi \sqrt{-A} = \eta. \quad (48)$$

Находим u как функцию η из уравнения (41'):

$$\frac{d^2 u}{d\eta^2} + \frac{n+1}{\eta} \frac{du}{d\eta} + \left(\frac{D}{(2\sqrt{-A})^3} \eta - \frac{1}{4} + \frac{B}{\sqrt{-A}} \frac{1}{\eta} \right) u = 0. \quad (41')$$

Это уравнение очень тесно связано с так называемыми полиномами Лагерра. В Математическом приложении показано, что n -я производная $(n+k)$ -го полинома Лагерра, умноженная на $e^{-\frac{x}{2}}$, удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$y'' + \frac{n+1}{x} y' + \left(-\frac{1}{4} + \left(k + \frac{n+1}{2} \right) \frac{1}{x} \right) y = 0$$

и что для закрепленного n указанные функции образуют полную систему собственных функций написанного выше уравнения, если k пробегает все неотрицательные целые числа. Из этого следует, что выражение (41') при $D=0$ обладает собственными функциями

$$u_k(\eta) = e^{-\frac{\eta}{2}} L_{n+k}^n(\eta), \quad (49)$$

соответствующими собственным значениям

$$\frac{B}{\sqrt{-A}} = \frac{n+1}{2} + k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (50)$$

и никаким другим! (О замечательном исчезновении непрерывного спектра в результате кажущегося невинным преобразования (48) см. Математическое

приложение. Построение теории возмущений очень облегчается благодаря этому факту.)

Следует рассчитать возмущение собственных значений (50) при добавлении D -члена в уравнении (41') согласно общей теории § 1. Уравнение принимает самосопряженную форму при умножении на η^{n+1} . Весовая функция $\rho(x)$ общей теории будет равна η^n . Роль возмущающей функции $r(x)$ играет

$$-\frac{D}{(2\sqrt{-A})^3_+} \eta^{n+2}. \quad (51)$$

(Параметр возмущения λ формально полагаем равным 1; если бы мы пожелали, можно было бы положить равным единице D или F .)

Итак, формула (7') для возмущенного k -го собственного значения принимает вид

$$\epsilon_k = -\frac{D}{(2\sqrt{-A})^3_+} \frac{\int_0^\infty \eta^{n+2} e^{-\eta} [L_{n+k}^n(\eta)]^2 d\eta}{\int_0^\infty \eta^n e^{-\eta} [L_{n+k}^n(\eta)]^2 d\eta}. \quad (52)$$

Для интеграла, стоящего в знаменателе, который обычно обеспечивает нормирование, формула (115) приложения дает

$$\frac{[(n+k)!]^3}{k!}, \quad (53)$$

в то время как интеграл числителя, вычисленный там же, равен

$$\frac{[(n+k)!]^3}{k!} (n^2 + 6nk + 6k^2 + 6k + 3n + 2). \quad (54)$$

Вместе с тем имеет место соотношение

$$\epsilon_k = -\frac{D}{(2\sqrt{-A})^3_+} (n^2 + 6nk + 6k^2 + 6k + 3n + 2). \quad (55)$$

Ограничение, накладываемое на возмущенное собственное значение для k -го собственного значения уравнения (41') и отсюда, естественно, для k -го дискретного собственного значения исходного уравнения (41), определяется соотношением

$$\frac{B}{\sqrt{-A}_+} = \frac{n+1}{2} + k + \epsilon_k \quad (56)$$

(обозначение ϵ_k мы сохраним пока как удобное сокращение).

Мы применяем этот вывод два раза, а именно к двум последним уравнениям (38), подставляя обе системы значений (42) констант A, B, C, D .

Причем, кроме того, следует обратить внимание на то, что n в обоих случаях — одно и то же число, в то время как два значения k следует различать, как выше, индексами 1 и 2.

Прежде всего, имеем

$$\begin{aligned} \frac{B_1}{\sqrt{-A}} &= \frac{n+1}{2} + k_1 + \varepsilon_{k1}, \\ + \\ \frac{B_2}{\sqrt{-A}} &= \frac{n+1}{2} + k_2 + \varepsilon_{k2}. \end{aligned} \quad (57)$$

Отсюда

$$A = - \frac{(B_1 + B_2)^2}{(l + \varepsilon_{k1} + \varepsilon_{k2})^2}. \quad (58)$$

(Мы употребляем сокращение (46) для главного квантового числа.)

В приближении, которое мы ищем, нужно разложить A по степеням малой величины ε_k :

$$A = - \frac{(B_1 + B_2)^2}{l^2} \left[1 - \frac{2}{l} (\varepsilon_{k1} + \varepsilon_{k2}) \right]. \quad (59)$$

Далее, для вычисления этих малых величин по формуле (55) можно воспользоваться приближенным значением A (45). Таким образом, получаем, принимая во внимание оба значения D по формулам (42):

$$\begin{aligned} \varepsilon_{k1} &= \frac{Fh^4 l^3}{64\pi^4 m^2 e^5} (n^2 + 6nk_1 + 6k_1^2 + 6k_1 + 3n + 2), \\ \varepsilon_{k2} &= - \frac{Fh^4 l^3}{64\pi^4 m^2 e^5} (n^2 + 6nk_2 + 6k_2^2 + 6k_2 + 3n + 2). \end{aligned} \quad (60)$$

Сложение ε_{k1} и ε_{k2} дает после небольших преобразований

$$\varepsilon_{k1} + \varepsilon_{k2} = \frac{3Fh^4 l^4 (k_1 - k_2)}{32\pi^4 m^2 e^5}. \quad (61)$$

При подстановке в (59) значений констант A , B_1 , B_2 , определенных в (42), получаем после приведения

$$E = - \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2 l^2} - \frac{3}{8} \frac{h^2 F l (k_2 - k_1)}{\pi^2 m e}. \quad (62)$$

Пока что это наш конечный результат — хорошо известная формула Эпштейна для значений термов штарк-эффекта в водородном спектре. Величины k_1 и k_2 полностью соответствуют параболическим квантовым числам; они могут принимать значение нуль. Целое число n , которое связано с экваториальным квантовым числом согласно (40), также может быть равно нулю. Однако согласно (46) сумма этих трех чисел должна быть увеличена на единицу, чтобы дать главное квантовое число. Отсюда экваториальному квантовому числу соответствует не n , а $n+1$. Значение нуль для последнего волновой механикой автоматически исключается, так же как механикой

Гейзенберга *. Не существует никакой собственной функции, т. е. не существует никакого состояния колебания, которое соответствовало бы точному меридиональному пути. Это важное и радостное обстоятельство, впрочем, было уже установлено на с. 15 первого сообщения при вычислении констант, затем на с. 16, где при рассмотрении азимутального квантового числа было показано, что не существует состояния колебаний, соответствующих траекториям, аналогичным траектории движения маятника. Полное значение этого факта мне стало ясным после ознакомления с замечаниями обоих цитированных авторов.

Для последующего применения отметим систему собственных функций, принадлежащих к собственным значениям (62) уравнения (32). Она получается из выражения (37) и из результатов (39) и (49), если принять во внимание преобразования (47) и (48) и приближенные значения (45) для A .

Для краткости обозначим радиус первой орбиты водорода через a_0 . Имеем

$$\frac{1}{2l\sqrt{-A}} = \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2} = a_0. \quad (63)$$

Собственные функции (еще не нормированные) имеют вид

$$\psi_{n k_1 k_2} = \lambda_1^{\frac{n}{2}} \lambda_2^{\frac{n}{2}} e^{-\frac{\lambda_1 + \lambda_2}{2la_0}} L_{n+k_1}^n \left(\frac{\lambda_1}{la_0} \right) L_{n+k_2}^n \left(\frac{\lambda_2}{la_0} \right) \frac{\sin n\varphi}{\cos n\varphi}. \quad (64)$$

Они принадлежат к собственным значениям (62), причем l имеет значение (46). Каждой неотрицательной целочисленной тройке значений n , k_1 , k_2 принадлежат две или одна собственные функции (из-за двойного знака $\frac{\sin}{\cos}$), в зависимости от того, $n > 0$ или $n = 0$.

§ 4. Попытка вычисления интенсивностей и поляризации наблюдаемой картины расщепления

Недавно я показал **, что из собственных функций дифференцированием и квадратурами можно вычислить элементы матриц, которые в квантовой механике Гейзенберга соответствуют функциям обобщенных координат положения и импульса. Например, для rr' -го элемента той матрицы, которая по Гейзенбергу принадлежит обобщенной координате q , находят выражение

$$q_{rr'} = \int q \rho(x) \psi_r(x) \psi_{r'}(x) dx \left\{ \int \rho(x) [\psi_r(x)]^2 dx \cdot \int \rho(x) [\psi_{r'}(x)]^2 dx \right\}^{-1/2}. \quad (65)$$

В нашем случае индексы r , r' представляют каждый из индексов n , k_1 , k_2 , а x — три координаты r , ϑ , φ ; $\rho(x)$ — функция плотности (34). (Ср. само-сопряженное уравнение (32') с общим видом (2).) Нужно добавить множи-

* W. Pauli jun. Z. Phys., 1926, 36, 336; N. Bohr. Naturwissenschaften, 1926, H. 1.

** Ann. Physik, 1926, 79, 734 [с. 56 наст. изд.].

тель $(\dots)^{-1/2}$ в выражении (65), так как система функций (64) еще не нормирована.

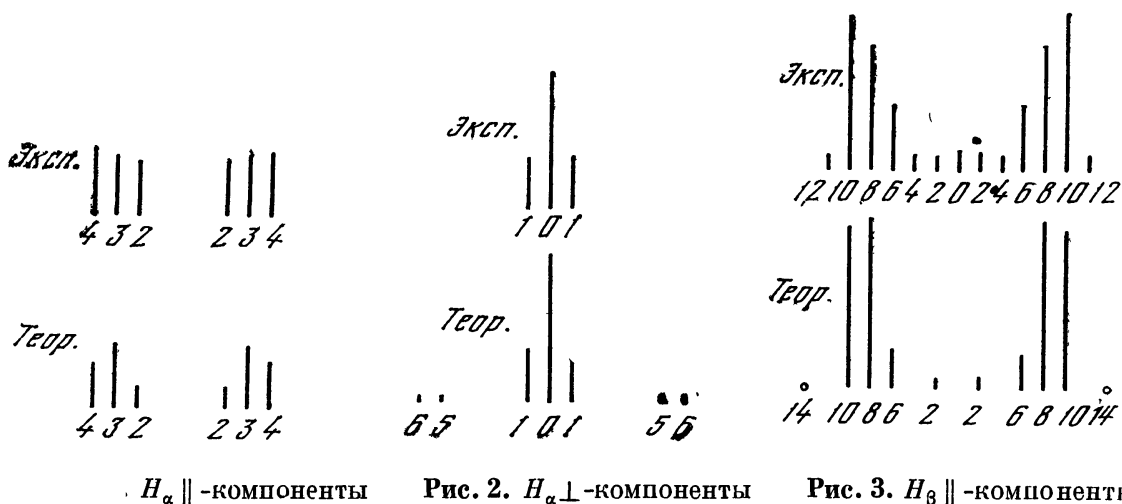
Согласно Гейзенбергу *, если q означает прямоугольную декартову координату, то квадрат элемента матрицы (65) определяет меру «вероятности перехода из r -го состояния в r' -состояние», точнее говоря, интенсивность той части излучения, связанного с этим переходом, которое поляризовано в направлении q . Согласно с этим, я показал в указанном выше месте, что при известных простых предположениях об электродинамическом значении механического полевого скаляра ϕ элемент матрицы, о котором идет речь в волновой механике, получает наглядный смысл, а именно: это компонента амплитуды периодически колеблющегося электрического момента атома, причем компонента в двойном смысле: 1) компонента в q -направлении, т. е. в исследуемом направлении в пространстве; 2) та часть пространственной компоненты, которая изменяется синусообразно во времени вместе с частотой излученного света, $|E_r - E_{r'}|/h$. (Речь идет, следовательно, о некотором виде разложения Фурье, но не по гармоническим частотам, а по реально существующим частотам излучения.) При этом в основе волновой механики, вообще говоря, лежит не представление о внезапном переходе из одного состояния колебания в другое, а о соответствующем парциальном моменте (как мы назовем для краткости), возникающем из совокупного существования обоих собственных колебаний, моменте, существующем до тех пор, пока они оба возбуждены.

Следует уточнить утверждение, что $q^{rr'}$ пропорциональны парциальным моментам: например, отношение $q^{rr'}$ к $q^{rr''}$ равно отношению соответствующих парциальных моментов, если собственная функция ϕ_r возбуждена произвольно, а обе собственные функции $\phi_{r'}$ и $\phi_{r''}$ возбуждены одинаково (при соответствующем нормировании). При вычислении отношения интенсивностей следует сначала возвести в квадрат q -величину, а затем умножить ее на четвертую степень частоты излучения. Последнее не играет никакой роли в соотношении интенсивности компонент штарк-эффекта, потому что должны сравниваться только интенсивности линий приблизительно равных частот.

Известное правило отбора и правила поляризации компонент штарк-эффекта ясны почти без вычисления из интегралов числителя в (65) и из вида собственных функций (64). Они следуют из обращения в нуль или, соответственно, необращения в нуль интеграла по ϕ . Компоненты, электрический вектор которых параллелен полю, т. е. колеблется в направлении z , получаются заменой в соотношении (65) q на z по формуле (33). Выражение для z , т. е. $1/2 (\lambda_1 - \lambda_2)$, не содержит азимута φ .

Непосредственно из (64) видно, что ненулевой результат при интегрировании по ϕ может иметь место только тогда, когда комбинируются собственные функции с равными n , т. е. с равными экваториальными квантовыми числами $n+1$. Для компонент колебания, нормальных полю, следует подставить x или y вместо q , см. уравнение (32). Сюда войдут также $\cos \varphi$ или

* W. Heisenberg. Z. Phys., 1925, 33, 879; M. Born, P. Jordan. Z. Phys., 1925, 34, 867, 886.



$\sin \varphi$. Легко видеть (как это было показано и выше), что n значений обеих комбинирующихся собственных функций должны отличаться точно на единицу, если интегрирование по φ дает ненулевой результат. Этим доказаны известные правила отбора и правило поляризации. Далее здесь нужно напомнить, что теперь не надо исключать ни одного n -значения из дополнительных соображений, как это было необходимо в старых теориях, чтобы согласовать их с опытом. Наше n на единицу меньше, чем экваториальное квантовое число и заведомо не имеет отрицательных значений. (Совершенно то же самое положение, как известно, лежит в основе теории Гейзенберга *).

Подсчет интегралов в (65) по λ_1 и λ_2 необычайно скучен, особенно в числителе. Используется тот же вычислительный аппарат, который уже применялся при вычислении выражения (52); он только осложняется тем, что нужно интегрировать произведение обобщенных ортогональных функций Лагерра, имеющих различные аргументы. К счастью, для линий серии Бальмера, которые наиболее интересны для физиков, один из полиномов L_{n+k}^n является либо постоянной, либо линейной функцией своего аргумента; это полином, относящийся к двухквантовому состоянию. Путь вычислений точнее описан в Математическом приложении.

Следующие таблицы [3] и схемы дают результаты для первых четырех линий Бальмера, в сравнении с известными изменениями и оценками интенсивности, полученными Штарком для силового поля порядка 100 000 В/см **. Первое расщепление соответствует состоянию поляризации, второе — комбинации термов в обычном обозначении, т. е. в наших символах: тройка чисел $(k_1, k_2, n+1)$ — первая тройка — относится к более высокому квантовому состоянию. Третье расщепление, обозначенное символом Δ , дает расщепление термов на кратные $3h^2F/8\pi^2me$ (см. уравнение (62)). Следующее расщепление дает интенсивности, наблюдаемые Штарком, причем 0 означает «не

* W. Pauli jun. Z. Phys., 1926, 36, 336.

** J. Stark. Ann. Physik, 1915, 48, 193.

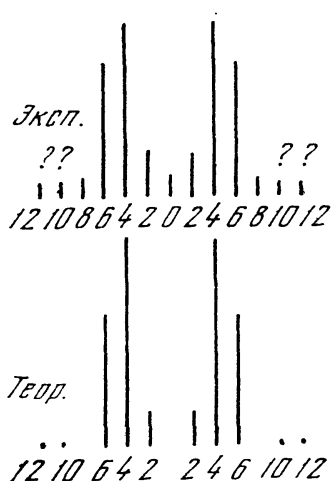


Рис. 4. $H_{\beta\perp}$ -компоненты

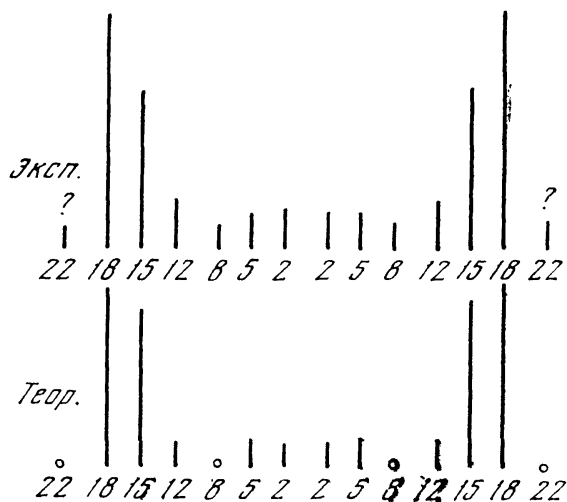


Рис. 5. $H_{\gamma\parallel}$ -компоненты

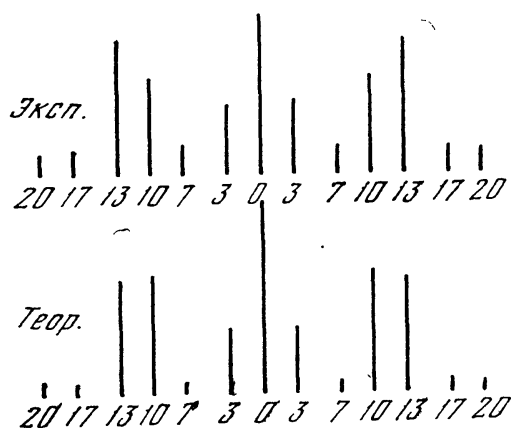


Рис. 6. $H_{\gamma\perp}$ -компоненты

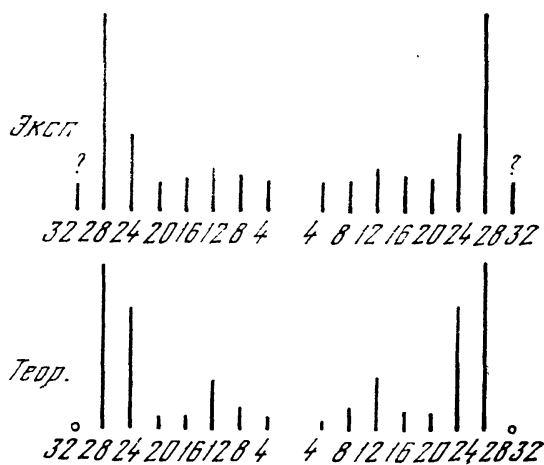


Рис. 7. $H_{\gamma\parallel}$ -компоненты

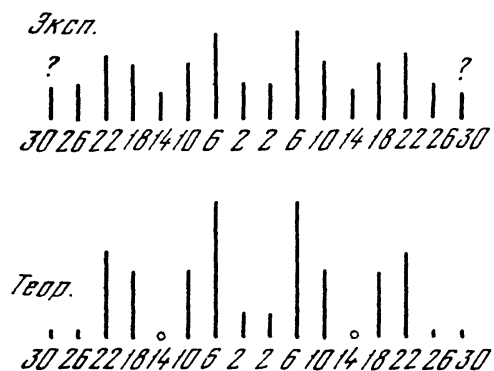


Рис. 8. $H_{\delta\perp}$ -компоненты

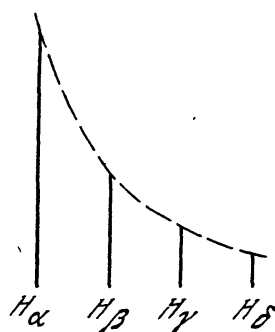


Рис. 9. Полная интенсивность

ИНТЕНСИВНОСТИ ЛИНИЙ БАЛЬМЕРА В ШТАРК-ЭФФЕКТЕ

Таблица 1

 H_{α}

Поляризация	Комбинация	Δ	Наблюдаемая интенсивность	Вычисленная интенсивность
	(111) (011)	2	1	729
	(102) (002)	3	1,1	2304
	(201) (101)	4	1,2	1681
	(201) (011)	8	0	1
С у м м а 4715				
⊥	(003) (002)	0	} 2,6 {	4608
	(111) (002)	0		882
	(102) (101)	1	1	1936
	(102) (011)	5	0	16
	(201) (002)	6	0	18
С у м м а 4715				

Таблица 2

 H_{β}

Поляризация	Комбинация	Δ	Наблюдаемая интенсивность	Вычисленная интенсивность
	(112) (002)	0	1,4	0
	(211) (101)	2	1,2	9
	—	(4)	1	0
	(211) (011)	6	4,8	81
	(202) (011)	8	9,1	384
	(301) (101)	10	11,5	361
	—	(12)	1	0
	(301) (011)	14	0	1
С у м м а 836				
⊥	—	(0)	1,4	0
	(112) (011)	2	3,3	72
	(103) (002)	4	} 12,6 {	384
	(211) (002)	4		72
	(202) (101)	6	9,7	294
	—	(8)	1,3	0
	(202) (011)	10	1,1?	6
	(301) (002)	12	1?	8
С у м м а 836				

Таблица 3

 H_γ

Поляризация	Комбинация	Δ	Наблюдаемая интенсивность	Вычисленная интенсивность
	(221) (011)	2	1,6	15 625
	(212) (002)	5	1,5	19 200
	(311) (101)	8	1	1 521
	(311) (011)	12	2,0	16 641
	(302) (002)	15	7,2	115 200
	(401) (101)	18	10,8	131 769
	(401) (011)	22	1?	729

С у м м а 300 685

⊥	(113) (002)	0	}	7,2	{	115 200
	(221) (002)	0				26 450
	(212) (101)	3				46 128
	(212) (011)	7	}	1,2	{	5 808
	(203) (002)	10				76 800
	(311) (002)	10				11 250
	(302) (101)	13				83 232
	(302) (011)	17				2 592
	(401) (002)	20				1

С у м м а 300 685

Таблица 4

 H_δ

Поляризация	Комбинация	Δ	Наблюдаемая интенсивность	Вычисленная интенсивность
	(222) (002)	0	0	0
	(321) (101)	4	1	8
	(321) (011)	8	1,2	32
	(312) (002)	12	1,5	72
	(411) (101)	16	1,2	18
	(411) (011)	20	1,1	18
	(402) (002)	24	2,8	180
	(501) (101)	28	7,2	242
	(501) (011)	32	1?	2

С у м м а 572

Таблица 4 (окончание)

Поляризация	Комбинация	Δ	Наблюдаемая интенсивность	Вычисленная интенсивность
$\perp$	(222) (011)	2	1,3	36
	(213) (002)	6	}	162
	(321) (002)	6		36
	(312) (101)	10		98
	(312) (011)	14	1	2
	(303) (002)	18	}	90
	(411) (002)	18		9
	(402) (101)	22		125
	(402) (011)	26	1,3	5
	(501) (002)	30	1	9

Сумма 572

Примечание Несмещенные компоненты в таблицах разделены на две

наблюдается». Штарк отметил знаком вопроса те линии, которые переналагаются с чужими линиями или с возможными «духами» и поэтому определены недостаточно уверенно. Из-за неодинакового ослабления обоих состояний поляризации в спектрографе данные Штарка для $\parallel$ - и $\perp$ -компонент колебания несравнимы. В последнем столбце приведены результаты наших вычислений, т. е. относительные значения, которые позволяют сравнить все $\parallel$ - и $\perp$ -компоненты одной линии, например H_α , но не дают возможности сравнивать H_α и H_β и т. д. Эти относительные числа приведены к их наименьшим целочисленным значениям; это означает, что числа в каждой из четырех таблиц не имеют общих делителей.

Что касается диаграмм, то надо заметить, что из-за чрезвычайных различий теоретических интенсивностей некоторые из них не могли быть правильно показаны в принятом масштабе, так как слишком малы. Они отмечены на диаграммах маленькими кружками.

Рассмотрение диаграмм показывает, что почти для всех сильных компонент согласие хорошее, причем несколько лучше, чем в оценках, сделанных в свое время на основе принципа соответствия *. Устранено, например, одно из самых серьезных противоречий, состоящее в том, что принцип соответствия приводил для двух сильных $\perp$ -компонент линии H_β на рассогласиях $\Delta=4$, $\Delta=6$ к противоположному соотношению интенсивностей, а именно почти 1 : 2, в то время как эксперимент требует округленно 5 : 4. Такое же положение было с экспериментально полученными большими средними $\perp$ -компонентами H_γ (при $\Delta=0$), которые согласно принципу соответствия должны быть крайне малыми. Правда, на наших диаграммах также встречается такого рода противоположный характер соотношения интенсивностей, требуемых теорией и экспериментом, для интенсивных компонент. Теорети-

* H. A. Kramers. Dänische Akademie (8) III, 1919, 3, 333 ff.

чески сильнее всего возмущается самая интенсивная $\parallel$ -компонента ($\Delta=3$) линии H_α , которая согласно эксперименту по величине силы должна находиться между соседями. Теория приводит также для двух самых сильных $\parallel$ -компонент H_β и двух $\perp$ -компонент H_γ ($\Delta=10,13$) к отношению, обратному по сравнению с результатами эксперимента, правда, в обоих случаях отношение сил как экспериментально, так и теоретически близко к 1.

Бегло просмотрев более слабые компоненты, замечаем, что даже в новой теории остается очевидное противоречие, состоящее в том, что некоторые из наблюдаемых слабых компонент H_β не согласуются с правилами отбора и поляризации, которые одинаковы в старой и новой теории. В общем, однако, теоретически крайне слабые компоненты в большинстве случаев не наблюдались или наблюдение их сомнительно. Теория почти никогда не определяет или определяет только приблизительно отношение сил слабых компонент друг к другу или к сильным; сравним особенно данные об H_γ и H_δ . Такие крупные ошибки при определении почернения, конечно, полностью исключены.

После всего изложенного можно склониться к утверждению, что интегралы (65), соответственно их квадраты, являются мерой интенсивности, однако судить об этом следует весьма осторожно. Я не хотел бы считать это утверждение непреложным, ибо еще возможны самые различные изменения, которые могут потребоваться при дальнейшем развитии теории из ее внутренних основ. Все же необходимо вспомнить следующее. Все наше вычисление проведено с невозмущенными собственными функциями, точнее говоря, с возмущенными собственными функциями нулевого приближения (ср. выше, § 2).

Таким образом, наш расчет представляет собой только приближение для исчезающе малых силовых полей! Для слабых или даже исчезающе малых компонент из теоретических соображений следует ожидать довольно сильное возрастание с ростом силового поля по следующим причинам. Согласно изложенной во Введении основной точке зрения волновой механики, интегралы (65) представляют собой амплитуды парциальных электрических моментов, возникающих в силу электрического поля, порождаемого ядром в той области атома, в которой как бы протекает некоторое количество электричества. Если для компонент какой-либо линии в нулевом приближении получается очень малая или почти совсем исчезающая интенсивность, то причиной этого является не тот факт, что обоим совместно существующим собственным колебаниям соответствует слабое движение электричества или полное отсутствие его; колеблющееся количество электричества при соответствующей нормировке должно сделать равными все компоненты (если говорить расплывчато). Скорее всего, причиной малой интенсивности линий является высокая степень симметрии движения электричества, благодаря чему возникает только очень малый дипольный момент или же он не возникает совсем (а, например, возникает только квадрупольный момент). Поэтому нужно ожидать, что исчезновение компоненты линии при каком-либо возмущении является сравнительно неустойчивым состоянием, так как

при возмущении, вероятно, будет нарушена симметрия. Итак, следует ожидать, что интенсивность слабых или исчезающе слабых компонент быстро растет с увеличением напряженности поля.

Действительно, именно это и наблюдается: отношения интенсивностей при напряженности поля уже приблизительно 10 000 гаусс значительно изменяются с изменением этой напряженности силового поля. Если я правильно понимаю суть дела, из изложенных выше общих соображений вытекает именно такой вывод *. Более строгое заключение о том, является ли изложенное подлинным объяснением встречающихся отклонений, может дать только дальнейшее вычисление ближайшего приближения, которое очень трудоемко и сложно.

Приведенные выше рассуждения, само собой разумеется, являются не более чем «переводом» хорошо известных расчетов интенсивностей линий, которые Бор ** основывал на соображениях принципа соответствия, на язык новой теории.

Теоретические интенсивности, приведенные в таблицах, удовлетворяют фундаментальному требованию, которое должно быть установлено не только чисто интуитивно, но и из эксперимента ***: сумма интенсивностей для $\parallel$ -компонент равна сумме для $\perp$ -компонент. Для проведения расчета несмещенные компоненты должны быть разделены пополам, что заменяет удвоение всех остальных компонент, появляющихся по обеим сторонам несмещенных. Это представляет собой очень хороший контроль правильности вычислений.

Интересно сравнить полные интенсивности четырех линий, используя четыре «суммы», приведенные в таблицах. Я убираю из моих численных подсчетов четыре множителя, которые должны быть сокращены для того, чтобы отношения интенсивностей внутри каждой из групп линий представить по возможности наименьшими целыми числами, и перемножаю. Далее я умножаю каждое из этих четырех произведений на четвертую степень частоты излучения. Получаются следующие четыре числа:

$$\begin{aligned} \text{для } H_{\alpha} \dots \frac{2^6 \cdot 23 \cdot 41}{3^2 \cdot 5^9} &= 0,003433\dots, \\ \text{для } H_{\beta} \dots \frac{4 \cdot 11 \cdot 19}{3^{12}} &= 0,001573\dots, \\ \text{для } H_{\gamma} \dots \frac{2^8 \cdot 3^6 \cdot 11^2 \cdot 71}{5 \cdot 7^{13}} &= 0,0008312\dots, \\ \text{для } H_{\delta} \dots \frac{11 \cdot 13}{2^{15} \cdot 3^2} &= 0,0004849\dots \end{aligned}$$

Я привожу эти числа с ббльшим числом значащих цифр, чем прежние, так как упомянутая четвертая степень частоты линий теоретически не кажется

* J. Stark. Ann. Physik, 1914, 43, 1001 f.

** N. Bohr. Dänische Akademie (8), 1918, 4, 35.

*** J. Stark. Ann. Physik, 1914, 43, 1004.

мне точной. Рассуждения, о которых я недавно сообщил, свидетельствуют скорее о шестой степени *.

Изложенный способ вычисления точно соответствует предложениям Борна, Иордана, Гейзенберга **. Рис. 9 представляет наглядную диаграмму.

Для сравнения с опытом в этом случае не могут быть привлечены действительно измеренные интенсивности линий излучения, которые, как известно, сильно зависят от условий возбуждения. Р. Ладенбург и Ф. Рейхе ***, исходя из опытов Ладенбурга **** по дисперсии и магнитному вращению в окрестности H_α и H_β , нашли расчетом для отношения так называемых «электронных чисел» обеих этих линий значение 4, 5 (крайние значения 3 и 6). Если я предположу, что приведенные выше числа следует считать пропорциональными выражению Ладенбурга *****,

$$\sum \frac{g_k}{g_i} \alpha_{ki} \nu_0,$$

то их следует привести к относительным «электронным числам» делением на ν_0^3 , т. е. соответственно на:

$$\left(\frac{5}{36}\right)^3, \left(\frac{3}{16}\right)^3, \left(\frac{21}{100}\right)^3, \left(\frac{2}{9}\right)^3.$$

Таким способом получаем следующие четыре числа:

$$1,281, 0,2386, 0,08975, 0,04418.$$

Отношение первого ко второму 5,37, что достаточно хорошо согласуется с оценкой Ладенбурга.

§ 5. Рассмотрение штарк-эффекта методом, соответствующим методу Бора [5]

Для того чтобы дать пример общей теории возмущений § 2, я хотел бы наметить исследование проблемы собственных значений уравнения (32). Это уравнение следовало бы выбрать за исходное, если не принимать во

* Ann. Physik, 79, 755, уравнение (38) [см. с. 74. наст. изд.].

В случае четвертой степени электрический момент сам не влияет на квадрат ускорения [4]. В уравнение (38), на которое мы здесь ссылаемся, входит еще в явном виде множитель $(E_k - E_m)/h$. Мы пришли к этому из-за появления $\partial/\partial t$ в записи выражения (36) (см. там же).

Д о б а в л е н и е п р и к о р р е к т у р е. Хотя я и надеялся облегчить рассмотрение этого $\partial/\partial t$ при дальнейшем релятивистском обобщении, но эта надежда оказалась ошибочной. В записи (36), указанную выше, нужно поставить $\psi\bar{\psi}$. Таким образом, сомнения в четвертой степени, высказанные раньше, отпадают.

** Ср.: M. Born, P. Jordan. Z. Phys., 1925, 34, 887.

*** R. Ladenburg, F. Reiche. Naturwissenschaften, 1923, 584.

**** R. Ladenburg. Ann. Phys. (4), 1912, 38, 249.

***** Ср.: R. Ladenburg, F. Reiche, l. с. Первая формула на второй половине с. 584. Множитель ν_0 в упомянутом выше выражении указывает на то, что вероятность перехода α_{ki} следует умножить на квант энергии, чтобы получить интенсивность излучения.

внимание, что в параболических координатах возмущенное уравнение также допускает разделение переменных. Итак, оставим полярные координаты r , ϑ , φ , заменяя z на $r \cos \vartheta$, и введем вместо r новую переменную η преобразованием

$$2r \sqrt{-\frac{8\pi^2 m E}{h^2}} = \eta \quad (66)$$

(которое аналогично преобразованию (46) для параболической координаты ξ). Для одного из невозмущенных собственных значений (45) получается из (66) выражение

$$\eta = \frac{2r}{l\alpha_0}, \quad (66')$$

где α_0 — та же константа, что в (63). («Радиус самой нижней орбиты атома водорода».) Подставим это выражение и невозмущенное собственное значение (45) в исследуемое уравнение (32), тогда получим

$$\Delta' \psi + \left(-\frac{1}{4} - g\eta \cos \vartheta + \frac{1}{\eta} \right) \psi = 0, \quad (67)$$

где используется сокращение

$$g = \frac{a_0^2 F l^3}{4e}. \quad (68)$$

Штрих в операторе Лапласа должен указывать только на то, что в нем следует для радиус-вектора писать букву η .

В уравнении (67) принимаем l за собственное значение, член с g — возмущающий член. Не следует беспокоиться по тому поводу, что в первое приближение для возмущающего члена входит собственное значение. При пренебрежении возмущающим членом уравнение имеет только целочисленные собственные значения

$$l=1, 2, 3, 4... \quad (69)$$

и никаких других. (Непрерывный спектр опять устраняется искусственным приемом (66), что особенно ценно для более высоких приближений.) Соответствующие собственные функции (еще не нормированные) таковы:

$$\psi_{lnm} = P_n^m(\cos \vartheta) \frac{\cos}{\sin} (m\varphi) \cdot \eta^n e^{-\frac{n}{2}} L_{n+l}^{2n+1}(\eta). \quad (70)$$

Здесь P_n^m означает m -ю «присоединенную» шаровую функцию порядка n , $L_{n+l}^{2n+1} = (2n+1)$ -я производная $(n+l)$ -го полинома Лагерра*. Если $n < l$, то L_{n+l}^{2n+1} должно обращаться в нуль, так как порядок дифференцирования

* Собственные функции (70) я привел недавно (Ann. Physik, 1926, 79, 361), не заметив их связи с полиномами Лагерра. Для доказательства упомянутого выше представления см. Математическое приложение, 1.

выше, чем степень переменной. Принимая это во внимание, получаем при вычислении шаровых функций, что l есть l^2 -кратное собственное значение невозмущенного уравнения. Мы изучим теперь расщепление определенного в дальнейшем и фиксированного l при добавлении возмущающего члена.

Для этого мы должны, во-первых, нормировать (согласно § 20) собственные функции (70). Неинтересным вычислением, которое очень легко выполнить, используя формулы Приложения *, получаем нормирующий множитель, если $m \neq 0$,

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\frac{2n+1}{2}} \sqrt{\frac{(n-m)!}{(n+m)!}} \sqrt{\frac{(l-n-1)!}{[(n+l)!]^3}}, \quad (71)$$

а для $m=0$ значение в $\sqrt{2}$ раз меньше. Во-вторых, нам следует вычислить симметричную матрицу констант ε_{im} по (22). Величину r этой формулы следует отождествить с возмущающей функцией $g\eta^3 \cos\vartheta \sin\vartheta$, а собственные функции u_{ki} — с функциями (70), причем индексу k , который характеризует собственные значения, соответствует первый индекс l функции ϕ_{lm} , в то время как второму индексу i функции u_{ki} соответствует пара индексов nm функции ϕ_{lm} . Матрица констант (22) в данном случае квадратная — из l^2 строк и l^2 столбцов. Квадратуры легко выполняются по формулам Математического приложения и дают следующий результат. Те элементы матрицы, которые образованы из двух собственных функций ϕ_{lm} и $\phi_{l'n'm'}$, отличаются от нуля. Они удовлетворяют одновременно следующим условиям:

1. Верхние индексы присоединенных шаровых функций должны совпадать, $m=m'$.

2. Порядки обеих шаровых функций должны отличаться друг от друга точно на 1, $|n - n'| = 1$.

3. Каждой тройке индексов lnm соответствуют по (70) еще две шаровые функции (если $m \neq 0$) и притом такие две собственные функции ϕ_{lm} , которые отличаются друг от друга только тем, что одна содержит множитель $\cos m\varphi$, а другая — множитель $\sin m\varphi$. Третье условие гласит теперь: можно комбинировать синус с синусом или косинус с косинусом, а не крест-накрест.

Оставшиеся ненулевые элементы искомой матрицы характеризуются двумя парами индексов (n, m) и $(n+1, m)$. Чтобы не затемнять дело, постоянный индекс l опущен. Так как матрица симметрична, вполне достаточно одной пары индексов (n, m) , если мы положим, что первый индекс, т. е. индекс n , всегда больший из упорядоченной пары n, n' .

Тогда вычисление дает

$$\varepsilon_{nm} = -6 \lg \sqrt{\frac{(l^2 - n^2)(n^2 - m^2)}{4n^2 - 1}}. \quad (72)$$

Из этих элементов нам следует построить детерминант (23). Удобно его строки и столбцы расположить по следующему принципу. (Подчеркнем еще

* Следует отметить, что функция плотности $\rho(x)$ в уравнении (67) равна $\eta \sin \vartheta$, так как уравнение должно быть умножено на $\eta^2 \sin \vartheta$, чтобы получить самосопряженную форму.

раз нашу мысль: мы говорим о столбцах вместе с парой индексов, характеризующих первую из двух шаровых функций.) Итак, прежде всего входят все члены с $m=0$, затем все члены с $m=1$, а затем с $m=2$ и т. д., наконец, все члены с $m=l-1$, которое является наибольшим значением, какое может принимать m (так же, как и n). Внутри каждой группы расположим члены следующим образом: прежде всего все члены с $\cos m\varphi$, затем — с $\sin m\varphi$. Внутри каждой из этих «полугрупп» располагаем члены по возрастающим значениям m : $m, m+1, m+2, \dots, l-1$, т. е. всего $l-m$ значений.

После того как это сделано, оказывается, что ненулевые элементы (72) расположены исключительно по двум диагоналям, непосредственно примыкающим к главной диагонали. На главной диагонали стоят возмущенные собственные значения, которые нужно вычислить и которые мы полагаем отрицательными, а на всех остальных местах нули.

Далее, две упомянутые, соседние с главной, диагонали в тех местах, где они пересекают границы между упомянутыми выше «полугруппами», надо каким-либо удобным способом разбить нулями.

Тем самым весь детерминант распадается на произведение меньших детерминантов, чем «полугруппы», т. е. $2l-1$ сомножителей. Нам достаточно рассмотреть один из них. Запишем его, при этом обозначим искомое возмущенное собственное значение через ε (без индекса):

$$\begin{vmatrix} -\varepsilon & \varepsilon_{m+1,m} & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \varepsilon_{m+1,m} & -\varepsilon & \varepsilon_{m+2,m} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & \varepsilon_{m+2,m} & -\varepsilon & \varepsilon_{m+3,m} & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_{m+3,m} & -\varepsilon & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdot & \varepsilon_{l-1,m} & -\varepsilon \end{vmatrix}. \quad (73)$$

Если разделить каждый член на $6lg$, общий множитель всех ε_{nm} (ср. (72)), и принять временно

$$k^* = -\frac{\varepsilon}{6lg} \quad (74)$$

за неизвестное, то написанное выше уравнение $(l-m)$ -й степени (72) будет иметь следующие корни:

$$k^* = \pm(l-m-1), \quad \pm(l-m-3), \quad \pm(l-m-5), \dots, \quad (75)$$

ряд этих корней обрывается на ± 1 или 0 в зависимости от того, степень $l-m$ четная или нечетная. Доказательство нельзя найти, к сожалению, в Математическом приложении, потому что оно мне не удалось.

Если составим ряд (75) для каждого $m=0, 1, \dots, l-1$, то получим совокупность имеющих место возмущений главного квантового числа

$$\varepsilon = -6lgk^*. \quad (76)$$

Для того чтобы найти возмущенные собственные значения E (уровни термов) данного уравнения (32), нужно еще ввести выражение (76) и значение g из (68) и a_0 из (63) в

$$E = - \frac{2\pi^2 m e^4}{\hbar^2 (l + \epsilon)^2}. \quad (77)$$

Находим после преобразования

$$E = - \frac{2\pi^2 m e^4}{\hbar^2 l^2} - \frac{3}{8} \frac{\hbar^2 F l k^*}{\pi^2 m e}. \quad (78)$$

Сравнение с (62) показывает, что k^* есть разность параболических квантовых чисел $k_2 - k_1$. В согласии с (73) и с учетом упомянутой области значений m , видим, что k^* действительно принимает те же значения, что и указанная разность, а именно значения $0, 1, 2, \dots, l - 1$. Для кратности величин k^* и разности $k_2 - k_1$, само собой разумеется, найдем, если преодолеем расчетные трудности, то же значение, а именно $l - |k^*|$. Таким образом мы вычислим, исходя из общей теории возмущения, собственные значения первого порядка.

Следующий шаг состоял бы в решении системы линейных уравнений (21') общей теории относительно величин x . Эти величины согласно (18) дают (пока что при $\lambda=0$) возмущенные собственные функции нулевого порядка, т. е. не что иное, как представление собственных функций (64) в виде линейных форм собственных функций (70). Решение системы (21') в нашем случае, естественно, будет однозначным из-за значительной кратности корня ϵ . Решение весьма упрощается, если заметить, что уравнения распадаются на $2l - 1$ групп, или (чтобы сохранить введенное выше выражение) полугрупп с полностью разделенными переменными; на такое же число множителей распадался рассматриваемый выше детерминант (73). Далее мы можем после выбора определенного значения ϵ рассматривать как отличную от нуля только одну переменную x одной-единственной полугруппы, а именно такую, что детерминант (73) для выбранного значения ϵ обращается в нуль. Тогда определение этой полугруппы переменных однозначно.

Итак, достигнута цель — пояснить примером общий метод § 2. Так как продолжение вычисления не представляет никакого физического интереса, то я даже не старался привести в более ясный вид частное двух детерминантов, через которые непосредственно выражаются x , или представить приведение к главным осям каким-либо другим способом.

В общем можно сказать, что в данном случае метод вековых возмущений (§ 5) значительно менее удобен, чем прямое применение системы с разделяющимися переменными (§ 3). Я полагаю, что и в других случаях ее можно применить. Известно, что в обычной механике, вообще говоря, имеет место обратная картина.

III. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ

Предварительное замечание. Мы не намереваемся проводить здесь детальные вычисления, опущенные в тексте. Предполагается лишь кратко описать методы вычислений, которые можно применить более удачно в какой-либо другой аналогичной работе, если, конечно, не будет найдено что-нибудь лучшее, что очень возможно.

1. Обобщенные полиномы Лагерра и ортогональные функции

Как известно, k -й полином Лагерра $L_k(x)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению *

$$xy'' + (1 - x)y' + ky = 0. \quad (101)$$

Если заменить k на $n+k$ и продифференцировать n раз, то найдем, что n -я производная $(n+k)$ -го полинома Лагерра, которую обычно обозначают L_{n+k}^n , удовлетворяет уравнению

$$xy'' + (n+1-x)y' + ky = 0. \quad (102)$$

Далее простым преобразованием находим, что для $e^{-\frac{x}{2}}L_{n+k}^n(x)$ имеет место уравнение

$$y'' + \frac{n+1}{x}y' + \left(-\frac{1}{4} + \left(k + \frac{n+1}{2}\right)\frac{1}{x}\right)y = 0, \quad (103)$$

которое было использовано в § 3 согласно уравнению (41'). В этом случае обобщенные ортогональные функции Лагерра таковы:

$$x^{\frac{n}{2}}e^{-\frac{x}{2}}L_{n+k}^n(x). \quad (104)$$

Уравнение, определяющее эти функции, имеет вид

$$y'' + \frac{1}{x}y' + \left(-\frac{1}{4} + \left(k + \frac{n+1}{2}\right)\frac{1}{x} - \frac{n^2}{4x^2}\right)y = 0. \quad (105)$$

Обратимся теперь к уравнению (103). Будем считать, что n — фиксированное действительное целое число, k — параметр собственных значений; тогда согласно сказанному уравнение имеет в области $x \geq 0$ собственные функции

$$e^{-\frac{x}{2}}L_{n+k}^n(x), \quad (106)$$

* R. Courant, D. Hilbert, Кар. 2, § 11, 5, S. 78, уравнение (72).

соответствующие собственным значениям

$$k = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (107)$$

В тексте утверждалось, что они не имеют никаких других значений и в особенности непрерывного спектра. Это кажется парадоксом, так как уравнение

$$\frac{d^2 y}{d\xi^2} + \frac{n+1}{\xi} \frac{dy}{d\xi} + \left(-\frac{1}{(2k+n+1)^2} + \frac{1}{\xi} \right) y = 0, \quad (108)$$

в которое переходит (103) при подстановке

$$\xi = \left(k + \frac{n+1}{2} \right) x, \quad (109)$$

обладает непрерывным спектром, если принять за параметр собственного значения

$$E = \frac{-1}{(2k+n+1)^2}, \quad (110)$$

а именно собственными значениями являются все положительные значения E (ср. первое сообщение, анализ уравнения (7)).

Эти положительные значения E не могут соответствовать никаким собственным значениям k уравнения (103); это вытекает из того, что соответствующие значения k , в согласии с (110), были бы комплексными, что по общим теоремам* невозможно. Каждое действительное собственное значение уравнения (103) дает согласно (110) отрицательные собственные значения уравнения (108). Далее известно, что уравнение (108) не имеет никаких других отрицательных собственных значений (ср. первое сообщение), кроме точно тех, которые можно получить с помощью числового множества (107) из (110). Остается еще только одна возможность: в ряде чисел (107) отсутствуют некоторые отрицательные k , которые возникают при решении уравнения (110) относительно k из-за двузначности корня. Однако и это невозможно, так как соответствующие значения меньше, чем $-\frac{n+1}{2}$, и поэтому согласно общим предложениям** не могут быть собственными значениями уравнения (103). Итак, ряд собственных значений (107) полный, что и требовалось доказать.

Изложенное выше является доказательством того, что функции (70) представляют собой собственные функции уравнения (67) (без возмущающего члена), соответствующие собственным значениям (69). Представим решение уравнения (67) как произведение функции, зависящей от ϑ , φ , и функции, зависящей от η . Уравнение относительно η легко привести к форме (105), единственная особенность его заключается в том, что здесь n — нечетное число.

* *R. Courant, D. Hilbert*, Kap. 3, § 4, 2, S. 115.

** *Ibid.*, Kap. 5, § 5, 1, S. 240.

2. Определенные интегралы произведения двух ортогональных функций Лагерра

Полиномы Лагерра могут быть связаны следующим соотношением (как коэффициенты разложения в ряд так называемой производящей функции вспомогательной переменной t *):

$$\sum_{k=0}^{\infty} L_k(x) \frac{t^k}{k!} = \frac{e^{-\frac{xt}{1-t}}}{1-t}. \quad (111)$$

Заменим теперь k на $n+k$ и продифференцируем n раз по x , таким образом найдем производящую функцию нашего обобщенного полинома

$$\sum_{k=0}^{\infty} L_{n+k}^n(x) \frac{t^k}{(n+k)!} = (-1)^n \frac{e^{-\frac{xt}{1-t}}}{(1-t)^{n+1}}. \quad (112)$$

С помощью этого соотношения можно вычислить такие интегралы, которые встречаются впервые в тексте в выражении (52) или же более общие, как в § 4 при вычислении (63), а также необходимые в § 5. Поступим следующим образом. Напишем (112) еще раз, при этом заменим как постоянный индекс n , так и переменный индекс k индексами со штрихами, а t заменим на s . Перемножим соответствующие части этих двух уравнений. Затем умножим на

$$x^p e^{-x} \quad (113)$$

и проинтегрируем по x от 0 до ∞ . При этом p должно быть положительным целым числом — для наших целей этого достаточно. Интегрирование правой части проводится элементарно и получаем

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{k'=0}^{\infty} \frac{t^k s^{k'}}{(n+k)! (n'+k')!} \int_0^{\infty} x^p e^{-x} L_{n+k}^n(x) L_{n'+k'}^{n'}(x) dx = \\ = (-1)^{n+n'} p! \frac{(1-t)^{p-n} (1-s)^{p-n'}}{(1-ts)^{p-1}}. \end{aligned} \quad (114)$$

Слева, как бусы, нанизаны искомые интегралы, которые остается только вычислить, чтобы были найдены коэффициенты $t^k s^{k'}$. Эти коэффициенты обычно являются простой суммой; в тех случаях, которые встречаются в тексте, — постоянной конечной суммой с очень малым числом членов (до трех). Получаем

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} x^p e^{-x} L_{n+k}^n(x) L_{n'+k'}^{n'}(x) dx = \\ = p! (n+k)! (n'+k')! \sum_{\tau=0}^{\leq k, k'} (-1)^{n+n'+k+k'+\tau} \binom{p-n}{k-\tau} \binom{p-n'}{k'-\tau} \binom{-p-1}{\tau}. \end{aligned} \quad (115)$$

* Ibid., Кар. 2, § 11, 5, S. 78, уравнение (68).

Сумма обрывается при небольших числах k, k' , она начинается на самом деле чаще всего только при положительных τ , так как биномиальные коэффициенты, с нижним индексом меньшим верхнего, обращаются в нуль. Таким же образом для интегралов знаменателя (52) положим $p=n'=n$ и $k'=k$. Тогда можно принять для τ только одно значение и доказать выражение (55) текста. Для интеграла числителя (52) p имеет другое значение, именно $p=n+2$. Для величины τ следует принять теперь значения $k-2$, $k-1$ и k ; простым преобразованием получается формула (54) текста. Таким же образом вычисляются интегралы с функциями Лагерра, встречающиеся в § 5.

Интегралы типа (115) можно считать известными. Осталось только вычислить интенсивности в случае § 4 (ср. выражение (65), в которое следует ввести функции (64)). Обе ортогональные функции Лагерра, произведение которых интегрируется, должны иметь различные аргументы, например, аргументы λ_1/la_0 и $\lambda_1/l'a_0$, где l и l' — главные квантовые числа комбинаемых нами двух уровней.

Как общий случай рассмотрим интеграл

$$J = \int_0^{\infty} x^p e^{-\frac{\alpha+\beta}{2}x} L_{n+k}^n(\alpha x) L_{n'+k'}^{n'}(\beta x) dx. \quad (116)$$

Можно применить при этом различные способы. Во-первых, легко перенести сюда предыдущий метод, причем лишь в правой части (114) появится несколько более сложное выражение: в знаменателе вместо степени двучлена — степень четырехчлена. И это делает рассмотрение трудно обозримым, так как в правой части (114) вместо трехкратной суммы будет пятикратная, а в правой части (115) вместо простой суммы — трехкратная. Более наглядной я считаю следующую подстановку:

$$\frac{\alpha+\beta}{2}x = y, \quad (117)$$

откуда

$$\alpha x = \left(1 + \frac{\alpha-\beta}{\alpha+\beta}\right)y, \quad \beta x = \left(1 - \frac{\alpha-\beta}{\alpha+\beta}\right)y, \quad (118)$$

с последующим разложением обоих полиномов в ряды Тейлора; эти ряды конечны и таковы, что их коэффициенты равны коэффициентам полиномов.

Получим, если ввести обозначения

$$\sigma = \frac{2}{\alpha+\beta}, \quad \gamma = \frac{\alpha-\beta}{\alpha+\beta}, \quad (119)$$

следующее выражение:

$$J = \sigma^{p+1} \sum_{\lambda=0}^k \sum_{\mu=0}^{k'} (-1)^\mu \frac{\gamma^{\lambda+\mu}}{\lambda! \mu!} \int_0^{\infty} y^{p+\lambda+\mu} L_{n+k}^{n+\lambda}(y) L_{n'+k'}^{n'+\mu}(y) dy. \quad (120)$$

Тем самым вычисление величины J сводится к вычислению более простого интеграла (115). Использование двойной суммы в (120) при рассмотрении

линий Бальмера удобно, так как здесь одно из двух значений k , а именно относящееся к двухквантовому уровню, не превосходит 1, λ принимает самое большее два значения, а, как мы потом выясним, μ имеет самое большее четыре значения.

Дальнейшие упрощения возможны в силу того, что полиномы в (120), относящиеся к двухквантовому уровню, представляют собой не что иное, как

$$L_0 = 1, \quad L_1 = -x + 1, \quad L'_1 = -1.$$

Далее следует провести вычисление на основе табличных данных, и очень жаль, что приведенные в наших таблицах значения интенсивностей не позволяют построить общую картину. К счастью, вследствие введенного выше соотношения между $||$ - и $\perp$ -компонентами, мы, по крайней мере с некоторой вероятностью, ограждены от ошибок вычисления.

3. Интегралы с шаровыми функциями

Для проведения вычислений в § 5 необходимы три простых интегральных соотношения между присоединенными функциями, которые я для удобства привожу здесь, так как нигде не мог их найти. Как обычно, определим

$$P_n^m(\cos \vartheta) = \sin^m \vartheta \frac{d^m P_n(\cos \vartheta)}{(d \cos \vartheta)^m}. \quad (121)$$

Тогда имеет место соотношение нормирования

$$\int_0^\pi [P_n^m(\cos \vartheta)]^2 \sin \vartheta d\vartheta = \frac{2}{2n+1} \frac{(n+m)!}{(n-m)!}. \quad (122)$$

Далее,

$$\int_0^\pi P_n^m(\cos \vartheta) P_{n'}^m(\cos \vartheta) \cos \vartheta \sin \vartheta d\vartheta = 0 \quad \text{для } |n - n'| \neq 1. \quad (123)$$

Затем

$$\begin{aligned} \int_0^\pi P_n^m(\cos \vartheta) P_{n-1}^m(\cos \vartheta) \cos \vartheta \cdot \sin \vartheta d\vartheta &= \\ &= \frac{n+m}{2n+1} \int_0^\pi P_{n-1}^m(\cos \vartheta) \sin \vartheta d\vartheta = \frac{2(n+m)!}{(4n^2-1)(n-m-1)!}. \end{aligned} \quad (124)$$

Два последних соотношения — основные для выбора членов детерминанта с. 108.

Кроме всего прочего, они имеют фундаментальное значение в теории спектров, так как очевидно, что на них основан принцип отбора азимутального квантового числа (и двух следующих, где вместо $\cos \vartheta \sin \vartheta$ стоит $\sin^2 \vartheta$).

Д о б а в л е н и е п р и к о р р е к т у р е [6]

Господин В. Паули младший сообщил мне, что посредством модификации способа решения, приведенного под номером (2) Приложения, он пришел к следующим замкнутым выражениям для полной интенсивности линий серии Лаймана и серии Бальмера:

для серии Лаймана

$$\nu_{l,1} = R \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{l^2} \right), \quad J_{l,1} = \frac{2^7 (l-1)^{2l-1}}{l(l+1)^{2l+1}};$$

для серии Бальмера

$$\nu_{l,2} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{l^2} \right), \quad J_{l,2} = \frac{4^3 (l-2)^{2l-3}}{l(l+2)^{2l+3}} (3l^2 - 4)(5l^2 - 4).$$

Согласно этим выражениям полная интенсивность излучения пропорциональна квадрату амплитуды, умноженной на четвертую степень частоты. Для серии Бальмера числа, следующие из этих формул, находятся в полнейшем соответствии с приведенными нами на с. 104.

Поступило 10 мая 1926 г.

КВАНТОВАНИЕ КАК ЗАДАЧА О СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЯХ¹

Четвертое сообщение*

§ 1. Исключение параметра энергии из уравнения колебания.

Собственное волновое уравнение.

Неконсервативные системы

Волновые уравнения (18) и (18') второго сообщения (с. 36) имеют вид

$$\Delta\psi - \frac{2(E - V)}{E^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0, \quad (1)$$

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2}{h^2} (E - V)\psi = 0. \quad (1')$$

Они образуют основу ряда наших статей (1—4-е сообщения), в которых сделана попытка найти новое обоснование механики. Это новое обоснование имеет тот недостаток, что оно выражает закон изменения «механического полевого скаляра» ψ не единственным и не общим образом. Уравнение (1) содержит параметр энергии для частоты E и выполняется лишь для процессов с определенным значением E , которое зависит от времени только через периодический множитель

$$\psi \sim PRe^{\pm \frac{2\pi i E t}{h}}. \quad (2)$$

Уравнение (1) поэтому на самом деле не более общее, чем уравнение (1'), которое уже не содержит времени.

Мы назвали уравнение (1) или (1') «волновым». Это, собственно говоря, неправильно. Правильнее было бы назвать его «колебательным» или «амплитудным».

Мы должны использовать именно это уравнение, так как с ним связана задача Штурма—Лиувилля о собственных значениях, а отнюдь не с собственным волновым уравнением (точно так же, как в аналогичной проблеме свободных колебаний струны и мембраны).

Мы предполагали до сих пор, что потенциальная энергия V зависит только от координат и не зависит явно от времени. Однако существует необходимость распространить теорию на неконсервативную систему, так как только таким образом удастся изучить поведение системы под действием внешних сил, например под действием световой волны или пролетающего атома. До тех пор, пока V содержит в явном виде время, невозможно, чтобы уравнениям (1) и (1') удовлетворяла функция ψ , зависящая от времени со-

¹ *E. Schrödinger. Ann. Physik, 1926, 81, 109. Перевод Н. В. Александровой.*

* Ср.: *Ann. Physik, 1926, 79, 361, 489; 80, 437* [с. 8, 21, 75 наст. изд.]. О связи с теорией Гейзенберга: *ibid.*, 79, S. 734 [с. 56 наст. изд.].

ласно выражению (2). Итак, в этом случае недостаточно амплитудного уравнения, и мы вынуждены обратиться к собственно волновому уравнению.

Для консервативных систем это легко сделать. Выражение (2) эквивалентно уравнению

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = - \frac{4\pi^2 E^2}{h^2} \psi. \quad (3)$$

Из (1) и (3) E можно исключить дифференцированием и получить

$$\left(\Delta - \frac{8\pi^2}{h^2} V\right)^2 \psi + \frac{16\pi^2}{h^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0. \quad (4)$$

Этому уравнению должна удовлетворять каждая функция ψ , при произвольном E зависящая от времени в соответствии с (2), а следовательно, и каждая функция ψ , разложимая по времени в ряд Фурье (естественно, с коэффициентами, являющимися функциями координат). Уравнение (4) поэтому единственное и общее волновое для полевого скаляра ψ .

Легко видеть, что оно представляет собой уравнение колебания мембраны очень простого типа с производными по координатам четвертого порядка и имеет вид, часто встречающийся в многочисленных задачах теории упругости*. Нет оснований бояться чрезмерной сложности теории и также нет необходимости в пересмотре методов, примененных к уравнению (1). Если V не содержит времени, то, исходя из уравнения (4), можно принять допущение (2); благодаря этому оператор в (4) представляется следующим образом:

$$\left(\Delta - \frac{8\pi^2}{h^2} V + \frac{8\pi^2}{h^2} E\right) \left(\Delta - \frac{8\pi^2}{h^2} V - \frac{8\pi^2}{h^2} E\right) \psi = 0. \quad (4')$$

Это уравнение можно разложить на два, связанных между собой по типу «или-или»: на уравнение (4') и другое, отличающееся от (4') только тем, что его параметр собственного значения равен $-E$ вместо $+E$, что согласно выражению (2) не дает нового решения. Однако такое разложение (4') отнюдь не является обязательным, так как для операторов несправедлива теорема: «Произведение обращается в нуль только тогда, когда обращается в нуль по крайней мере один из множителей». С таким далеко неудовлетворительным положением мы постоянно сталкиваемся при решении дифференциальных уравнений в частных производных. Рассматриваемый метод имеет некоторое дополнительное обоснование в доказательстве полноты системы найденных собственных функций как функций координат. Именно в силу этого не только действительная, но и мнимая часть (2) удовлетворяет уравнению (4), причем выполняются любые начальные условия для ψ и $\partial\psi/\partial t$.

Итак, мы видим, что волновое уравнение (4), которое включает в себе закон дисперсии, действительно может служить основой развитой до сих пор теории консервативных систем. Его обобщение на случай потенциальной функции, переменной во времени, требует некоторой осторожности, так как

* Например, при колебании пластины $\Delta\Delta u + \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0$. Ср.: R. Courant, D. Hilbert, Kap. 5, § 8, S. 256.

могут появиться члены с производными по времени функции V , о которых на основании уравнения (4) (по самому способу его вывода) нельзя сделать никакого заключения. На самом деле при попытке перенести уравнение (4) на неконсервативные системы мы наталкиваемся на сложности, появляющиеся как будто из-за члена с $\partial V/\partial t$. Поэтому в дальнейшем я пойду по другому пути, более простому с вычислительной точки зрения. Этот путь я считаю принципиально самым правильным.

Не следует повышать порядок волнового уравнения до четвертого для того, чтобы исключить из него параметр энергии. Для того чтобы уравнение (1) правильно описывало физические явления, можно выразить требуемую зависимость ψ от времени вместо соотношения (3) через

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \pm \frac{2\pi i}{h} E \psi. \quad (3')$$

Это приводит к одному из двух уравнений

$$\Delta \psi - \frac{8\pi^2}{h} V \psi \mp \frac{4\pi i}{h} \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0. \quad (4'')$$

Мы потребуем, чтобы комплексная волновая функция ψ удовлетворяла одному из этих уравнений. Так как сопряженная комплексная функция $\bar{\psi}$ не удовлетворяет этому уравнению, то следует рассматривать действительную часть комплексной волновой функции ψ как волновую функцию (если это необходимо). В случае консервативной системы уравнения (4'') и (4) по существу эквивалентны, так как если V не содержит времени, то действительный оператор может быть разложен в произведение двух комплексно-сопряженных.

§ 2. Распространение теории возмущений на возмущения, содержащие время в явном виде.

Теория дисперсии

Главный интерес для нас представляют консервативные системы, у которых прибавление малых заданных функций времени (и координат) вызывает возмущение потенциальной энергии, а не системы, у которых временные колебания потенциальной энергии V того же порядка, что и пространственные. Мы можем, следовательно, записать

$$V = V_0(x) + r(x, t), \quad (5)$$

где x (как это уже было раньше) представляет совокупность конфигурационных координат. Невозмущенную задачу отыскания собственных значений ($r=0$) можно считать решенной. Тогда возмущенная задача решается в квадратурах.

Однако мы не будем рассматривать общую задачу, а выберем из большого числа важных применений, охватываемых приведенным рассмотрением, теорию дисперсии ввиду ее большого значения. В этой задаче рассматрива-

ются возмущающие силы, возникающие в области изучаемого атома из-за переменного однородного и синхронно колеблющегося электрического поля. Следовательно, если речь идет о линейном поляризованном монохроматическом свете частоты ν , то для возмущающего потенциала имеем выражение

$$r(x, t) = A(x) \cos 2\pi\nu t \quad (6)$$

и, следовательно,

$$V = V_0(x) + A(x) \cos 2\pi\nu t. \quad (5')$$

Здесь $A(x)$ — отрицательное произведение амплитуды света на ту функцию координат, которая (согласно обычной механике) определяет компоненты электрического момента атома в направлении электрического вектора света (как, например, $-F \sum e_i z_i$, где F — амплитуда света, e_i, z_i — заряд и координата точечной массы, а свет поляризован в направлении z). Мы отбрасываем зависящую от времени часть потенциальной функции с тем же основанием, что и в обычной механике, как, например, постоянную в задаче Кеплера.

Если использовать выражение (5'), то уравнение (4'') преобразуется в

$$\Delta\psi - \frac{8\pi^2}{h^2} (V_0 + A \cos 2\pi\nu t) \psi \mp \frac{4\pi i}{h} \frac{\partial\psi}{\partial t} = 0. \quad (7)$$

Если положить $A=0$, то с помощью

$$\psi = u(x) e^{\pm \frac{2\pi i E t}{h}} \quad (8)$$

эти уравнения превращаются в амплитудное уравнение (1') невозмущенной задачи (которое рассматривается сначала не как *para realis*, а в его прямом значении). Известно (ср. § 1), что таким образом находится совокупность решений невозмущенной задачи. Пусть E_k и $u_k(x)$, $k=1, 2, 3, \dots$, — собственные значения и нормированные собственные функции невозмущенной задачи; их можно считать известными. Для того чтобы не уклоняться от рассмотрения основной проблемы, мы считаем их также дискретными и различными (невырожденная система без непрерывного спектра). Нам придется искать решения возмущенной задачи точно так же, как в случае возмущенного потенциала, не зависящего от времени. При этом мы будем искать его в окрестности каждого возможного решения невозмущенной задачи. Другими словами, в окрестности любой линейной комбинации функций $u_k(x)$ с постоянными коэффициентами (зависимости их от времени выражаются

согласно (8) множителями вида $e^{\pm \frac{2\pi i E_k t}{h}}$). Решения возмущенной задачи, лежащие в окрестности определенной линейной комбинации, будут иметь тот же физический смысл, что и при анализе задачи о падении световой волны. В этой задаче рассматривалась точно такая же определенная линейная комбинация свободных собственных колебаний (может быть, с незначительным изменением при явлении «раскачки»).

Однако уравнение возмущенной задачи также однородно; это сильно ухудшает аналогию с «вынужденными колебаниями» акустики, что следует

особо подчеркнуть! В силу этой однородности, очевидно, достаточно найти возмущенные решения в окрестности каждой отдельной функции

$$u_k(x) e^{\pm \frac{2\pi i E_k t}{h}}, \quad (9)$$

которые можно затем произвольно линейно комбинировать точно так же, как невозмущенные решения.

Для решения первого уравнения (7) составим следующую функцию:

$$\psi = u_k(x) e^{\pm \frac{2\pi i E_k t}{h}} + w(x, t). \quad (10)$$

(Нижний знак, т. е. второе уравнение (7), можно опускать, так как он не дает ничего нового.) Дополнительный член $w(x, t)$ можно считать малым и пренебречь его произведением на возмущающий потенциал. Подставив выражение (10) в уравнение (7), а также приняв во внимание, что $u_k(x)$ и E_k — собственная функция и собственное значение невозмущенной задачи, получим

$$\begin{aligned} \Delta w - \frac{8\pi^2}{h^2} V_0 w - \frac{4\pi i}{h} \frac{\partial w}{\partial t} &= \frac{8\pi^2}{h^2} A \cos 2\pi \nu t \cdot u_k e^{\frac{2\pi i E_k t}{h}} = \\ &= \frac{4\pi^2}{h^2} A u_k \left(e^{\frac{2\pi i t}{h} (E_k + h\nu)} + e^{\frac{2\pi i t}{h} (E_k - h\nu)} \right). \end{aligned} \quad (11)$$

Этому уравнению легко удовлетворить, если положить

$$w = \dot{w}_+(x) e^{\frac{2\pi i t}{h} (E_k + h\nu)} + w_-(x) e^{\frac{2\pi i t}{h} (E_k - h\nu)}, \quad (12)$$

где две функции $w_{\pm}$ удовлетворяют соответственно двум уравнениям

$$\Delta w_{\pm} + \frac{8\pi^2}{h^2} (E_k \pm h\nu - V_0) w_{\pm} = \frac{4\pi^2}{h^2} A u_k. \quad (13)$$

Этот шаг существенно однозначен. Сначала кажется, что в выражении (12) можно добавить еще произвольный многочлен из невозмущенных собственных колебаний. Однако этот многочлен должен иметь порядок ниже первого (так как это предположение сделано относительно w). Поэтому пока что он не представляет никакого интереса, так как вызывает более высокие возмущения второго порядка.

Мы пришли, наконец, к неоднородным уравнениям (13), которые стремились получить, несмотря на указанную выше неполноту аналогии с собственными вынужденными колебаниями. Этот недостаток аналогии исключительно важен и проявляется в уравнениях (13) в следующих двух обстоятельствах. Во-первых, в качестве «второго члена» («возбуждающей силы») в него входит не сама возмущающая функция $A(x)$, а произведение ее на соответствующую амплитуду свободных колебаний. Для того чтобы правильно описать физические факты, представляется необходимым считать реакцию атома на падающую световую волну зависящей в значительной степени от

его состояния. Вынужденные же колебания мембраны, пластины и т. д., как известно, совершенно не зависят от возможных наложений собственных колебаний и, следовательно, дают для нашей задачи совершенно непригодную картину. Во-вторых, в левую часть уравнения (13) вместо собственных значений, т. е. в качестве «возбуждающей частоты» входит не одна частота ν возмущающей силы: в одном случае — сумма, в другом — разность ее и частоты существующего свободного колебания. Это — неизбежное требование, так как в ином случае собственные частоты, соответствующие частотам термов, вызвали бы резонанс. Это противоречит тому, что на самом деле имеет место и к чему приводят уравнения (13). Относительно разности собственных частот хорошо известно, что надо рассматривать только разность действительно возбужденной собственной частоты и всех остальных, а не разность пар собственных частот, из которых ни одна не возбуждена.

Чтобы рассмотреть это точнее, доведем решение до конца. По хорошо известному методу * находим как однозначное решение уравнения (13)

$$w_{\pm}(x) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha'_{kn} u_n(x)}{E_k - E_n \pm h\nu}, \quad (14)$$

где

$$\alpha'_{kn} = \int A(x) u_k(x) u_n(x) \rho(x) dx. \quad (15)$$

Здесь $\rho(x)$ — «весовая функция», т. е. та функция координат положения, на которую нужно умножить каждый из членов уравнения (1'), чтобы сделать его самосопряженным. Предполагается, что функция $u_n(x)$ нормирована. Кроме того, предполагается, что $h\nu$ не совпадает точно ни с одной из разностей собственных значений $E_k - E_n$. Об этом «случае резонанса» речь пойдет ниже (ср. § 4).

Образуем теперь из уравнений (14) согласно (12) и (10) общее возмущенное колебание, получим

$$\psi = u_k(x) e^{\frac{2\pi i E_k t}{h}} + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \alpha'_{kn} u_n(x) \left(\frac{e^{\frac{2\pi i t}{h} (E_k + h\nu)}}{E_k - E_n + h\nu} + \frac{e^{\frac{2\pi i t}{h} (E_k - h\nu)}}{E_k - E_n - h\nu} \right). \quad (16)$$

Итак, в случае возмущений наряду с каждым свободным колебанием $u_k(x)$ имеют место колебания $u_n(x)$ малых амплитуд с $\alpha'_{kn} \neq 0$. Это те колебания, которые (если они существуют вместе с u_k как свободные колебания) вызывают излучение, поляризованное (полностью или частично) в направлении поляризации падающей волны. Так как α'_{kn} входят множителями, то согласно волновой механике не возникает ничего, кроме электрического момента атома, осциллирующего в направлении поляризации падающей амплитуды с частотой $(E_k - E_n)/h$, обусловленной одновременным существова-

* Ср. третье сообщение, § 1 и 2, соображения, развитые при рассмотрении уравнений (8) и (24).

нием u_k и u_n *. Однако это колебание не имеет ни частоты собственных колебаний E_n/h , ни частоты ν световой волны. Скорее его частота определяется суммой или разностью величин ν и E_k/h (т. е. частотой одного продолжающегося свободного колебания). Как истинное решение можно рассматривать действительную или мнимую части функции (16). Однако в дальнейшем мы будем иметь дело с самим комплексным решением.

Чтобы уяснить значение этих результатов для теории дисперсии [1], нужно исследовать излучение, возникающее вследствие совместного существования возбужденных вынужденных колебаний и первоначальных уже рассмотренных свободных колебаний. С этой целью образуем по употреблявшемуся уже способу ** (анализ его см. в § 7) произведение комплексной волновой функции (16) и сопряженного комплексного значения, т. е. норму комплексной волновой функции ψ . Заметим при этом, что возмущающие члены малы, так что можно пренебречь их квадратами и их произведениями. Простым преобразованием *** получаем

$$\psi\bar{\psi} = u_k(x)^2 + 2 \cos 2\pi\nu t \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(E_k - E_n) a'_{kn} u_k(x) u_n(x)}{(E_k - E_n)^2 - \hbar^2 \nu^2}. \quad (17)$$

Эвристическая гипотеза об электродинамическом значении полевого скаляра ψ привела нас при рассмотрении штарк-эффекта в водороде к верным правилам отбора и поляризации и к удовлетворительному представлению соотношения интенсивностей. В силу этой же гипотезы величина (17) — с точностью до постоянных множителей — представляет собой плотность электричества как функцию пространственных координат и времени, *если под x понимать только три пространственные координаты*, т. е. если речь идет об *одноэлектронной* задаче. В качестве разумного обобщения этой гипотезы (о чем подробнее см. в § 7) мы рассмотрим теперь в общем виде следующее утверждение для плотности электричества, которая «связана» с некоторой точечной массой классической механики или «проистекает из нее», или волновомеханически «соответствует ей»: она есть с точностью до некоторой постоянной классический «заряд» рассматриваемой точечной массы, умноженный на интеграл от $\psi\bar{\psi}$ по всем координатам системы, которые определяют в классической механике положение всех остальных точечных масс. Общая

* Ср. последующее и § 7.

** Ср.: Ann. Physik, 1926, 79, 755 [с. 73, наст. изд.]; кроме того, вычисление интенсивности штарк-эффекта в третьем сообщении. В первом источнике вместо $\psi\bar{\psi}$ предложена действительная часть $\psi\psi$. Это был недостаток, устраненный уже в третьем сообщении.

*** Ради простоты мы, как и прежде, принимаем, что собственные функции $u_n(x)$ действительны, однако заметим, что при известных условиях гораздо удобнее рассматривать комплексные комбинации действительных собственных функций, например для собственных функций задачи Кеплера необходимо рассматривать $e^{\pm m\varphi}$; вместо $\cos m\varphi$ и $\sin m\varphi$.

плотность заряда в некоторой точке пространства будет выражаться суммой названных интегралов по всем точечным массам.

Найдем какую-нибудь пространственную компоненту общего волново-механического дипольного момента как функцию времени. Согласно нашей гипотезе выражение (17) умножают на ту функцию координат, которая в классической механике дает соответствующую дипольную компоненту как функцию конфигурации точечной системы, т. е., например, на

$$M_y = \sum e_i y_i, \quad (18)$$

если рассматривается дипольный момент относительно оси y . Затем нужно проинтегрировать по всем конфигурационным координатам. Положим для краткости

$$b_{kn} = \int M_y(x) u_k(x) u_n(x) \rho(x) dx. \quad (19)$$

Поясним, кроме того, определение a'_{kn} согласно (15), напомним, что если падающий электрический световой вектор задается выражением

$$\mathfrak{E}_z = F \cos 2\pi\nu t, \quad (20)$$

то $A(x)$ имеет значение

$$A(x) = -F \cdot M_z(x), \quad (21)$$

где

$$M_z(x) = \sum e_i z_i.$$

Запишем по аналогии с (19)

$$\alpha_{kn} = \int M_z(x) u_k(x) u_n(x) \rho(x) dx, \quad (22)$$

т. е. $\alpha'_{kn} = -F \alpha_{kn}$, и найдем интегрированием

$$\int M_y \psi \bar{\psi} \rho dx = \alpha_{kk} + 2F \cos 2\pi\nu t \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(E_n - E_k) \alpha_{kn} b_{kn}}{(E_k - E_n)^2 - \hbar^2 \nu^2} \quad (23)$$

для результирующего электрического момента, который приписывается вторичному излучению, вызванному падающей волной (20).

Излучение зависит, конечно, только от второго члена, изменяющегося со временем, в то время как первый представляет дипольный момент, постоянный относительно времени и, возможно, связанный с первоначально действующими свободными колебаниями. Эта переменная часть могла бы соответствовать всем требованиям, которые можно предъявить к дисперсионной формуле. Примем во внимание поведение тех членов, названных «отрицательными», которые — в обычном способе выражения — соответствуют возможности перехода на более глубокий уровень ($E_n < E_k$). На них впервые обра-

тил внимание Крамерс *, исходя из принципа соответствия [2]. Вообще говоря, следует отметить, что наша формула формально тождественна формуле Крамерса для вторичного излучения, несмотря на различия в обозначениях и в способе рассуждений. Важная связь коэффициентов вторичного излучения и спонтанных коэффициентов излучения α_{kn} , b_{kn} установлена вполне отчетливо. В самом деле, вторичное излучение будет точно описываться в отношении его состояния поляризации **.

Что касается абсолютного вклада рассеянного излучения или, соответственно, индуцированного дипольного момента, то я мог бы полагать, что он будет правильно выражаться формулой (23), хотя и с точностью до численного множителя. Это имеет место (само собой разумеется), если выполняется введенная выше эвристическая гипотеза. Физическая размерность формулы (23) также правильна, так как в том случае, когда интеграл от собственной функции нормирован на единицу, α_{kn} , b_{kn} согласно (18), (19), (21), (22) являются электрическими моментами. Соотношение между дипольными моментами, индуцированным и спонтанным, такого же порядка, как и отношение избыточной потенциальной энергии $F\alpha_{kn}$ к «ступеньке энергии» $E_k - E_n$, если ν сильно отличается от соответствующей частоты испускания.

§ 3. Дополнения к § 2: возбужденные атомы, вырожденные системы, непрерывный спектр

Ради наглядности примем здесь некоторые специальные предположения и оставим в стороне многие вопросы, которые затем нужно будет обсудить дополнительно.

Прежде всего, что произойдет, если световая волна падает на атом, находящийся в состоянии, в котором возбуждено не только одно свободное колебание u_k , как мы принимали до сих пор, но больше, скажем, два: u_k и u_l ? Как уже замечено выше, в случае возмущения нужно сложить два возмущенных решения (16), соответствующих индексам k и l . Затем закрепить постоянные (возможно, комплексные) коэффициенты, которые для свободных колебаний соответствуют силам и фазе их возбуждения. Заметим, не проводя вычислений, что тогда в выражении для $\psi\bar{\psi}$ и также в выражении (23) для результирующего электрического момента появится не только соответствующая линейная комбинация входивших ранее членов (т. е. выражений (17) и (23), записанных один раз с индексом k , а другой — с l). В них войдут еще

* H. A. Kramers. Nature, 10.V 1924; *ibid.*, 30.VIII 1924; H. A. Kramers, W. Heisenberg. Z. Phys., 31, 681, 1925. Данное в последней статье описание поляризации рассеянного света, основанное на принципе соответствия (см. уравнение (27)) формально тождественно с нашими выражениями.

** Едва ли есть необходимость говорить, что оба направления, которые мы назвали ради простоты «z-направлением» и «y-направлением», не точно перпендикулярны друг другу. Одно из них — направление поляризации падающей волны, другое — направление той компоненты поляризации вторичной волны, которую мы рассматриваем.

«комбинационные члены»: во-первых, член более высокого порядка

$$u_k(x) u_l(x) e^{\frac{2\pi i}{h} (E_k - E_l) t}, \quad (24)$$

соответствующий спонтанному излучению, связанному с одновременным существованием обоих свободных колебаний; во-вторых, возмущающие члены первого порядка, которые пропорциональны возмущающей амплитуде поля и соответствуют взаимодействию вынужденных колебаний, относящихся к u_k , со свободными колебаниями u_l , а также вынужденных колебаний, относящихся к u_l , со свободными колебаниями u_k . Частота этих новых членов, появившихся в (17) и (23), равна не ν , а

$$|\nu \pm (E_k - E_l)/h|, \quad (25)$$

что мы отмечаем также, не проводя расчетов. (Новый «резонансный» знаменатель не входит, однако, в эти члены.) Итак, в этом случае мы имеем вторичное излучение, частота которого не совпадает ни с возбуждающей частотой света, ни со спонтанной частотой системы, а является комбинацией их обоих.

Наличие этого замечательного вида вторичного излучения было постулировано впервые Крамерсом и Гейзенбергом с помощью соображений, основанных на принципе соответствия, а затем Борном, Гейзенбергом и Иорданом на основе квантовой механики Гейзенберга *. Насколько нам известно, оно до настоящего времени не обнаружено экспериментально [3]. Предлагаемая теория позволяет ясно понять, что появление этого рассеянного излучения связано с особыми условиями; реализация их требует специально поставленного для этой цели эксперимента. Во-первых, должны возбуждаться два сильных собственных колебания u_k и u_l ; тем самым отбрасываются все опыты, поставленные на атомах в нормальном состоянии, а их подавляющее число. Во-вторых, должно существовать по меньшей мере одно третье состояние собственного колебания u_n (т. е., возможно, что это состояние не возбуждено), которое, комбинируя как с u_k , так и с u_l приводит к сильной спонтанной эмиссии. Тогда искомое необычное рассеянное излучение будет пропорционально произведению соответствующих коэффициентов спонтанной эмиссии ($\alpha_{kn} b_{ln}$ и $\alpha_{ln} b_{kn}$). Комбинация (u_k, u_l) сама по себе не должна давать сильного излучения, она не будет ничему мешать, если только для нее самой, выражаясь языком старой теории, этот «переход запрещен». Несмотря на это, практически нужно добавить также требование, состоящее в том, что линия (u_k, u_l) должна интенсивно излучаться во время опыта. Собственно говоря, это единственное средство убедиться в том, что оба собственных колебания сильно возбуждены (в атомах одного типа и в достаточном количестве).

Заметим теперь, что в сильных и наиболее исследуемых последовательностях термов, т. е. в обычных s -, p -, d -, f -последовательностях в основном

* *Born, Heisenberg, Jordan. Z. Phys.. 1926. 35. 572.*

выполняется следующее соотношение: два терма, хорошо комбинирующиеся с каким-либо третьим, не комбинируют между собой. Это означает, что необходим особый отбор объектов и условий опыта для того, чтобы можно было с уверенностью ожидать рассматриваемое нами рассеянное излучение. Такой отбор особенно важен там, где рассеянное излучение имеет другую частоту, чем падающий свет, и поэтому не возникает ни дисперсии, ни вращательной поляризации, а наблюдается только рассеянный во все стороны свет.

Упомянутая выше квантовомеханическая теория дисперсии Борна, Гейзенберга и Иордана не допускает, как мне представляется (несмотря на ее большую формальную аналогию с нашей концепцией), никаких подобных рассмотрений. Дело в том, что в ней рассматривается только реакция атома на падающее излучение. В этой теории атом считается неким вневременным целым и поэтому ничего нельзя сказать о том, как на языке этой теории можно выразить тот несомненный факт, что атом в различные времена может находиться в различных состояниях и что именно поэтому он реагирует различным образом на падающее излучение.

Обратимся теперь к другому вопросу. В § 2 собственные значения предполагались дискретными и различными. Отбросим второе предположение и спросим: что изменится, если встретятся кратные собственные значения, т. е. если налицо вырождение? Можно предположить, что появятся усложнения, аналогичные тем, которые встречаются в случае независимого от времени возмущения (третье сообщение, § 2). Это значит, что решением «векового уравнения» определена система собственных функций невозмущенного атома, претерпевшая специальные возмущения, и ее нужно будет применить к вычислению возмущений. Это имеет место в случае некоторого произвольного возмущения $r(x, t)$, как мы это предположили в уравнении (5). На самом деле, в случае возмущения световой волной уравнение (6) не имеет места, во всяком случае в первом приближении, употреблявшемся до сих пор, и до тех пор, пока мы придерживаемся предположения, что частота света ν не совпадает ни с какой рассматриваемой спонтанной частотой испускания. Именно тогда значение параметра в двух уравнениях (13), записанных для амплитуд возмущенных колебаний, не является собственным значением. Кроме того, эта пара уравнений имеет всегда однозначные решения (14), в которых ни один знаменатель не обращается в нуль, даже когда E_k — кратное собственное значение. При этом члены суммы, для которых $E_k = E_n$, не следует отбрасывать так же, как и член суммы с $n=k$. Замечательно, что вместе с этими членами (если один из них действительно входит в указанную сумму с ненулевым α_{kn}) среди резонансных частот появляется также частота $\nu=0$. Как видно из (23), эти члены не добавляют ничего к обычному рассеянному излучению вследствие $E_k - E_n = 0$.

Упрощение, возникающее в первом приближении, можно не принимать во внимание, как мы дальше покажем (ср. § 5), всегда, когда (как это имеет место в случае световой волны) усредненное по времени значение возмущающей функции равно нулю или, что то же самое, когда ее разложение в ряд Фурье по времени не содержит констант, т. е. членов, не зависящих от вре-

мени. Итак, наше первое предположение о собственных значениях — что они должны быть простыми — оказывается, собственно говоря, излишней предосторожностью, отказ от второго — что они должны быть непременно дискретными — также не влечет за собой никаких принципиальных изменений. Тем не менее возникают значительные изменения в способе вычислений. А именно: к дискретным суммам в формулах (14), (16), (17), (23) прибавляются интегралы по непрерывному спектру уравнения (1'). Теория такого интегрального представления развита Г. Вейлем *, впрочем, только для обыкновенных дифференциальных уравнений; она допускает распространение на уравнения в частных производных. Таково, вкратце, положение вещей **.

Если же однородное уравнение, соответствующее неоднородным уравнениям (13), т. е. уравнение колебания (1') невозмущенной системы, имеет наряду с точечным спектром также непрерывный, заключенный между $E=a$ и $E=b$, то произвольная функция $f(x)$ естественно может быть разложена по нормированным дискретным собственным функциям $u_n(x)$:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n u_n(x) \quad \text{при} \quad \varphi_n = \int f(x) u_n(x) \rho(x) dx; \quad (26)$$

нужно еще прибавить интегральное разложение по собственным решениям $u(x, E)$, которое соответствует собственным значениям $a \leq E \leq b$

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n u_n(x) + \int_a^b u(x, E) \varphi(E) dE. \quad (27)$$

При этом мы намеренно выбираем такие же буквы, чтобы подчеркнуть аналогию функций-«коэффициентов» $\varphi(E)$ с дискретными коэффициентами φ_n . Собственное решение $u(x, E)$ подходящим выбором некоторой функции от E нормируют так, чтобы

$$\int dx \rho(x) \int_{E'}^{E'+\Delta} u(x, E) u(x, E') dE' = \begin{cases} 1 \\ 0, \end{cases} \quad (28)$$

в зависимости от того, принадлежит E интегралу $E', E'+\Delta$ или нет. Тогда в разложении (27) под знаком интеграла надо поставить

$$\varphi(E) = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \int \rho(\xi) f(\xi) \int u(\xi, E') dE' d\xi, \quad (29)$$

* *H. Weyl. Math. Ann.*, 1910, 68, 220; *Gött. Nachr.*, 1910. Ср. также: *E. Hilb. Sitz.-Ber. Phys. Mediz. Soc. Erlangen*, 1911, 43, 68; *Math. Ann.*, 1911, 71, 76. Я благодарен г-ну Вейлю не только за эти литературные ссылки, но также и за содержательные устные наставления по этим не совсем простым вещам [4].

** Изложенным здесь представлением я обязан г-ну Е. Фюсу [5].

причем первый знак интеграла относится, как всегда, к основной области группы переменных x *.

Предположение о выполнимости (28) и существовании разложения (27) (как сказано выше, это доказано Вейлем для обыкновенных дифференциальных уравнений) делает почти столь же ясным определение «функции-коэффициента» согласно (29), как хорошо известное определение коэффициентов Фурье.

При этом главнейшая и труднейшая задача в каждом конкретном случае — нормирование функции $u(x, E)$, т. е. отыскание такой функции от E , на которую умножается не нормированное прежде собственное решение, соответствующее непрерывному спектру, для того, чтобы выполнялось условие (28). Для этой практической задачи цитированные выше работы г-на Вейля содержат очень ценные указания и некоторые вычислительные примеры. Один пример из атомной динамики приведен в исследовании Е. Фюса об интенсивностях полосатых спектров, появившемся одновременно в этих «Анналах» [6].

Обратимся теперь к нашей проблеме, т. е. к решению пары уравнений (13) для амплитуд $w_{\pm}$ вынужденных колебаний, причем мы предполагаем, как и раньше, что одно возбужденное свободное колебание u_k принадлежит дискретному точечному спектру. Представим правую часть уравнения (13), используя (27), следующим образом:

$$\frac{4\pi^2}{h^2} A(x) u_k(x) = \frac{4\pi^2}{h^2} \sum_{n=1}^{\infty} \alpha'_{kn} u_n(x) + \frac{4\pi^2}{h^2} \int_a^b u(x, E) \alpha'_k(E) dE, \quad (30)$$

где α'_{kn} определяются выражением (15), а $\alpha'_k(E)$ согласно (29) выражением (15)

$$\alpha'_k(E) = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \int_{E-\Delta}^{E+\Delta} \rho(\xi) A(\xi) u_k(\xi) \int_E u(\xi, E') dE' d\xi. \quad (15')$$

Положим, что в (13) подставлено разложение (30), и разложим искомое решение $w_{\pm}(x)$ совершенно аналогичным образом по собственным решениям $u_n(x)$ и $u(x, E)$. При этом примем во внимание, что для последней из названных функций левая часть уравнения (13) принимает значение

$$\frac{8\pi^2}{h^2} (E_k \pm h\nu - E_n) u_n(x),$$

соответственно

$$\frac{8\pi^2}{h^2} (E_k \pm h\nu - E) u(x, E).$$

* Как мне сообщил г-н Е. Фюс, на практике можно очень часто опускать предельный случай и для внутреннего интеграла писать $u(\xi, E)$, а именно тогда, когда существует

$$\int \rho(\xi) f(\xi) u(\xi, E) d\xi.$$

Тогда из «сравнения коэффициентов» получается как обобщение уравнения (14)

$$w_{\pm}(x) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha'_{kn} u_n(x)}{E_k - E_n \pm \hbar \nu} + \frac{1}{2} \int_a^b \frac{\alpha'_k(E) u(x, E)}{E_k - E \pm \hbar \nu} dE. \quad (14')$$

Дальнейшее рассмотрение совершенно аналогично проведенному выше в § 2. Наконец, в качестве добавочного члена к (23) получается

$$+ 2 \cos 2\pi \nu t \int d\xi \rho(\xi) M_y(\xi) u_k(\xi) \int_a^b \frac{(E_k - E) \alpha'_k(E) u(\xi, E)}{(E_k - E)^2 - \hbar^2 \nu^2} dE. \quad (23')$$

Здесь не всегда можно изменить порядок интегрирования без дополнительных обсуждений, так как интеграл по ξ , возможно, расходится. Однако

можно разбить интервал интегрирования $\int_a^b$ на куски длиной Δ , достаточно

малые, чтобы можно было считать постоянными все функции от E на каждом таком куске, за исключением $u(x, E)$, для которой, как это следует из общей теории, этого нельзя достичь фиксированным независимым от ξ делением на куски. Этот прием есть наглядный суррогат точного предельного перехода, который здесь можно выполнить. Тогда можно остальные функции получить из интегралов, взятых по этим частичным интервалам, и получить, наконец, в качестве добавочного члена к выражению для вторичного излучения дипольного момента (23) следующее слагаемое:

$$2F \cos 2\pi \nu t \int_a^b \frac{(E - E_k) \alpha_k(E) \beta_k(E)}{(E_k - E)^2 - \hbar^2 \nu^2} dE, \quad (23'')$$

причем

$$\alpha_k(E) = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \int \rho(\xi) M_z(\xi) u_k(\xi) \int_E^{E+\Delta} u(\xi, E') dE' d\xi, \quad (22')$$

$$\beta_k(E) = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \int \rho(\xi) M_y(\xi) u_k(\xi) \int_E^{E+\Delta} u(\xi, E') dE' d\xi. \quad (19')$$

(Я прошу отметить полную аналогию с формулами тех же номеров, без штрихов, § 2.)

Указанный выше набросок расчета представляет собой, естественно, не больше чем общую схему. Как показывает эксперимент*, по-видимому,

* K. F. Herzfeld, K. L. Wolf. Ann. Physik, 1925, 76, 71, 567; H. Kollmann, H. Mark. Naturwissenschaften, 1926, 14, 648.

должно существовать многообразное влияние непрерывного спектра на дисперсию, которое будет описываться теорией в точно ожидаемой форме. Это обстоятельство требует, чтобы изложенная выше теория была построена таким образом, чтобы открыть путь к математическому решению данной задачи [7].

§ 4. Обсуждение случая резонанса

Мы до сих пор постоянно предполагали, что частота ν падающей световой волны не совпадает ни с одной из рассматриваемых частот эмиссии. Примем теперь

$$h\nu = E_n - E_k > 0, \quad (31)$$

причем для упрощения изложения вернемся к ограничениям, введенным в § 2 (простые, дискретные собственные значения, возбуждается одно-единственное свободное колебание u_k). Тогда в паре уравнений (13) параметр собственного значения таков:

$$E_k \pm E_n \mp E_k = \begin{cases} E_n \\ 2E_k - E_n \end{cases}. \quad (32)$$

Таким образом, для верхних знаков существует одно собственное значение E_n . Тогда возможны два случая.

Первый случай: правая часть этого уравнения, умноженная на $\rho(x)$, ортогональна соответствующей собственной функции $u_n(x)$, т. е.

$$\int A(x) u_k(x) u_n(x) \rho(x) dx = \alpha'_{kn} = 0, \quad (33)$$

что физически означает: u_k и u_n будут поляризованы перпендикулярно направлению поляризации падающего света в том случае, если они оба существуют как свободные колебания и либо не вызывают никакого излучения, либо вызывают только спонтанное излучение. В этом случае критическое уравнение (13), как и раньше, имеет одно решение, которое, как и прежде, определяется соотношением (14), где «катастрофический член» обращается в нуль. Физически это означает, выражаясь на старом языке, что «запрещенный переход» не возбуждается резонансом. И, соответственно, что некоторый «переход» (если он не запрещен) не может возбуждаться светом, который колеблется перпендикулярно направлению поляризации света, излучаемого при «спонтанном переходе».

Рассмотрим вторую возможность: пусть условие (33) не выполняется. Тогда критическое уравнение не имеет решения. Здесь нельзя использовать выражение (10), которое является решением для некоторого колебания, только немного (на величину порядка амплитуды света F) отличающимся от первоначально существующего свободного колебания (и при этом предположении являющимся наиболее общим). Итак, не существует никакого решения, которое отличалось бы от первоначально существующего свободного колебания на величину порядка F . Падающий свет оказывает на состояние системы действие, меняющееся со временем и не зависящее от величины амплитуды

света. Какое же? Об этом нельзя судить без новых вычислений. При этом должен быть рассмотрен случай, когда условие резонанса (31) выполняется не точно, а лишь приближенно. Тогда видно из (16), что из-за малого знаменателя $u_n(x)$ возбудит необычайно сильные вынужденные колебания и что — и это не менее важно — частота этих вынужденных колебаний приближается к естественной собственной частоте E_n/h собственного колебания u_n . (Все это очень похоже на известные явления резонанса, но все-таки имеет своеобразные черты, иначе я не обсуждал бы это так обстоятельно.)

При постепенном приближении к критической частоте возбуждается собственное колебание u_n (ранее не возбуждавшееся), причем тем сильнее, чем критическая частота ближе к собственной частоте; возможность такого возбуждения и вызывает кризис. Однако в отличие от обычного явления резонанса наступает мгновение, притом еще до появления критической частоты, когда наше решение больше не описывает правильно явления. При этом нельзя забывать сделанное нами предположение, что точно выполняется волновая теорема, в которой не учитывается затухание. Поэтому мы можем рассматривать вынужденное колебание w как малое по сравнению с имеющимся свободным колебанием и (в уравнении (11)) можно пренебречь квадратичным членом.

Я полагаю, что указанные выше соображения позволяют понять уже с достаточной ясностью, что теория в случае резонанса действительно дает тот результат, который она должна дать, чтобы согласоваться с явлением резонанса Вуда: раскачивание данного собственного колебания u_n , ведущее к кризису (u_k по величине сравнимо с u_n), естественно приводит к «спонтанной эмиссии» спектральной линии (u_k, u_n). Однако здесь я не мог еще выполнить расчет случая резонанса, так как результат не имел бы особого смысла, поскольку в вычислении не учитывается обратное действие излучения на излучающую систему. Такое обратное воздействие должно существовать не только потому, что нет никаких оснований считать, что существует какое-либо принципиальное различие между падающей извне световой волной и световой волной, испускаемой самой системой, но также и потому, что иначе в представленной самой себе системе, при одновременном возбуждении многих собственных колебаний, спонтанная эмиссия длилась бы неограниченно долго. Должна существовать обратная связь, чтобы в данном случае наряду с эмиссией света более высокие собственные частоты постепенно ослаблялись, и, наконец, осталось бы одно основное колебание, которое соответствует нормальному состоянию системы. Эта обратная связь является, очевидно, точной аналогией силы реакции излучения классического электрона $\left(\frac{2e^2}{3mc^3} \ddot{v}\right)$.

Эта аналогия снимает также опасение, возникающее из-за того, что обратная связь до сих пор не принималась во внимание. Влияние соответствующего члена (может быть нелинейного) в волновом уравнении будет, вообще говоря, малым точно так же, как сила реакции излучения электрона в общем очень мала по сравнению с силой инерции и силой внешнего поля. Однако в случае резонанса, точно так же как в электронной теории, связь с собственной световой волной будет величиной того же порядка, как связь с падающей волной. Ее необходимо принимать во внимание, если мы хотим правильно расчи-

тать «равновесие» между различными собственными колебаниями, из которых состоит рассматриваемое излучение.

Необходимо, однако, заметить следующее: для избежания резонансной катастрофы не требуется член обратной связи! Такая катастрофа может возникнуть в силу незначительных причин, так как по доказанной ниже в § 7 теореме об устойчивости нормирования интеграла от $\psi\bar{\psi}$ по пространству конфигураций действие произвольной внешней силы остается постоянно нормированным к тому же значению — и при этом совершенно автоматически вследствие волнового уравнения (4''). Амплитуды ψ -колебаний не могут расти поэтому неограниченно, они имеют всегда «в среднем» одно и то же значение. Если одно собственное колебание будет возрастать, то какое-то другое должно уменьшаться.

§ 5. Обобщение на случай произвольного возмущения

Пусть имеется некоторое произвольное возмущение. Как предполагалось и прежде, в уравнении (5), в начале § 2, можно представить энергию возмущения $r(x, t)$ в виде ряда Фурье или интеграла Фурье по времени. Члены этого разложения имеют тогда форму (6) возмущающего потенциала некоторой световой волны. Легко видеть, что тогда в правой части уравнения (11) будут два ряда (или, возможно, два интеграла) по мнимым степеням ϵ вместо двух слагаемых. Пусть ни одна возбуждающая частота не совпадает с критической частотой. Тогда решение получается точно таким же путем, как в § 2, а именно как ряды Фурье по времени (или, возможно, интегралы Фурье). Нет никакого смысла здесь переписывать относящиеся сюда формальные разложения. Точное рассмотрение отдельных проблем лежит вне рамок настоящего сообщения. Однако нужно упомянуть важное обстоятельство, которого мы уже вскользь коснулись в § 3.

Среди критических частот уравнения (13) фигурирует, вообще говоря, также частота $\nu = E_k - E_k = 0$. Тогда и для этой частоты в левую часть уравнения (13) в качестве параметра собственного значения входит только одно собственное значение, а именно E_k . Итак, в ряд Фурье для возмущающей функции $r(x, t)$ входит также частота 0, т. е. член, не зависящий от времени. Тогда прежним путем не удастся прийти к цели. Однако легко показать, как его следует изменить, так как случай возмущения, постоянного во времени, нам уже известен (см. третье сообщение). Для рассмотрения этого вопроса надо использовать слабое наложение или расщепление собственного значения (или собственных значений) возбужденного свободного колебания. Это означает, что в показателе ϵ в выражении (10) вместо E_k следует записать: E_k плюс малая константа (возмущение собственного значения). Это возмущение собственного значения (как в третьем сообщении, § 1 и 2) определится из требования, чтобы правая часть критической константы Фурье уравнения (13) настоящего сообщения была ортогональна u_k (или, возможно, всем собственным функциям, соответствующим E_k).

Число специальных проблем, которые подходят под постановку задачи настоящего параграфа, чрезвычайно велико. Суперпозицией возмущений

постоянным электрическим или магнитным полем или световой волной можно получить магнитное и электрическое двойное предомлиение и магнитную вращательную поляризацию. Сюда же относится резонансное излучение в магнитном поле, для которого рассмотренный в § 4 случай резонанса приводит к точному решению. Кроме того, таким же образом можно будет рассмотреть действие на атом налетающей α -частицы или электрона *, когда расстояние между ними не слишком мало, чтобы можно было возмущение каждой из этих систем определить, исходя из невозмущенного движения другой. Все эти вопросы должны решаться простым расчетом, если только известны собственные значения и собственные функции невозмущенной системы. Можно поэтому надеяться, что эти функции будут определены, по крайней мере приближенно, для многоэлектронных атомов по аналогии с приближенным определением боровских электронных орбит, принадлежащих различным типам термов.

§ 6. Релятивистское обобщение основных уравнений с учетом магнитного взаимодействия

В дополнение к изложенным физическим проблемам, в которых магнитное поле играет важную, но не рассмотренную нами роль, можно сделать возможное релятивистское обобщение уравнений (4'') с учетом магнитного взаимодействия. Изложим его кратко применительно только к одноэлектронной задаче с максимально возможной сдержанностью. Последнее — исходя из двух оснований. Во-первых, это обобщение основывается на чисто формальной аналогии. Во-вторых, оно, как это уже было отмечено в первом сообщении **, в случае кеплеровой задачи формально приводит к формулам тонкой структуры Зоммерфельда при введении полуполных азимутальных и радиальных квантовых чисел, что в настоящее время считается правильным. Для получения численно верной картины расщепления водородных линий необходимо лишь одно добавление, которое вводится в картину Бора вращением электрона, предложенным Гаудсмитом и Уленбеком.

Гамильтоново дифференциальное уравнение в частных производных для лоренцева электрона может быть записано в следующей форме:

$$\left(\frac{1}{c} \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{e}{c} V\right)^2 - \left(\frac{\partial W}{\partial x} - \frac{e}{c} \mathcal{A}_x\right)^2 - \\ - \left(\frac{\partial W}{\partial y} - \frac{e}{c} \mathcal{A}_y\right)^2 - \left(\frac{\partial W}{\partial z} - \frac{e}{c} \mathcal{A}_z\right)^2 - m^2 c^2 = 0. \quad (34)$$

Здесь e , m , c — заряд, масса электрона, скорость света; V , $\mathcal{A}$ — электромагнитные потенциалы внешнего электромагнитного поля в месте нахождения электрона; W — функция действия.

* Э. Ферми принадлежит интересная и успешная попытка сопоставить действие пролетающих заряженных частиц (с помощью разложения напряженности их поля в ряд Фурье) с действием световой волны (Z. Phys., 1924, 29, 315).

** См.: Ann. Physik, 1926, 79, 372 [с. 8 наст. изд.].

Из классического (релятивистского) уравнения (34) надо вывести теперь волновое уравнение для электрона с помощью чисто формального подхода. Этот подход, как легко видеть, должен привести к уравнениям (4''), если использовать гамильтоново уравнение движения точечной массы в произвольном силовом поле, имеющее место в обычной (нерелятивистской) механике. Я подставляю в (34) после возведения в квадрат величины

$$\frac{\partial W}{\partial t}, \quad \frac{\partial W}{\partial x}, \quad \frac{\partial W}{\partial y}, \quad \frac{\partial W}{\partial z},$$

выраженные, соответственно, операторами

$$\pm \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}, \quad \pm \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad \pm \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \pm \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (35)$$

Полученный таким образом линейный двойной оператор, действующий на некоторую волновую функцию ψ , полагаю равным нулю:

$$\Delta\psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \mp \frac{4\pi ie}{hc} \left(\frac{V}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathfrak{A} \operatorname{grad} \psi \right) + \frac{4\pi^2 e^2}{h^2 c^2} \left(V^2 - \mathfrak{A}^2 - \frac{m^2 c^4}{e^2} \right) \psi = 0. \quad (36)$$

(Символы Δ и grad имеют здесь элементарное трехмерное евклидово значение.)

Два уравнения (36) представляют собой возможное релятивистское обобщение уравнения (4'') с учетом магнитного взаимодействия для случая одного единственного электрона и должны пониматься в том смысле, что комплексная волновая функция должна удовлетворять одному из уравнений (36).

Для атома водорода из (36) получаются формулы тонкой структуры Зоммерфельда точно таким же способом, каким они были получены в первом сообщении, а также могут быть получены выражения (при пренебрежении членами с $\mathfrak{A}^2$) для нормального эффекта Зеемана и хорошо известные правила отбора и поляризации совместно с формулами интенсивности; они следуют из выведенного в конце третьего сообщения интегрального соотношения между шаровыми функциями.

Принимая во внимание причины, указанные в начале этого параграфа, я отказываюсь пока от дальнейшего распространения этих расчетов и рассматриваю в следующем параграфе только «классическую» формулировку теории, не касаясь ее несовершенного еще релятивистского обобщения с учетом магнитного взаимодействия.

§ 7. О физическом значении полевого скаляра [8]

В § 2 эвристическая гипотеза об электродинамическом значении полевого скаляра ψ , развитая ранее для одноэлектронной задачи, была обобщена на систему заряженных точечных масс, и обстоятельное обсуждение такого подхода оказалось весьма обнадеживающим. Мы подсчитали плотность электричества в произвольной точке пространства следующим образом: была взята одна точечная масса, закреплены три координаты, которые согласно обычной механике описывают ее положение, ψ проинтегрировано по всем другим

координатам системы и результат умножен на некоторую определенную константу, представляющую «заряд» рассматриваемой точечной массы. Подобным же образом поступили с каждой точечной массой (тройкой координат), причем каждый раз выделяемой точечной массе приписываем положение той точки пространства, в которой хотим определить плотность электричества. Последняя равна алгебраической сумме таких отдельных результатов.

Это правило равнозначно следующему утверждению, в котором лучше виден настоящий смысл ψ : $\psi\bar{\psi}$ есть некая весовая функция в пространстве конфигураций системы. Волновомеханическая конфигурация системы есть суперпозиция многих, строго говоря всех, кинематически возможных конфигураций, реализующихся в механике точки. При этом каждая такая конфигурация входит со своим весом в истинную волновомеханическую конфигурацию, вес которой задается именно выражением $\psi\bar{\psi}$. Тот, кто любит парадоксы, может сказать, что система находится одновременно во всех кинематически возможных положениях, но не во всех «одинаково сильно». При макроскопическом движении эти весовые функции стягиваются в малую область практически неразличимых положений, центр тяжести которых прочерчивает в координатном пространстве воспринимаемый нами путь. При рассмотрении микроскопического движения во всяком случае представляет интерес также, и для известных вопросов даже в первую очередь, меняющееся распределение в указанной выше области.

Это истолкование может с первого взгляда шокировать после того, как мы до сих пор весьма часто в такой наглядной определенной форме говорили о « ψ -колебаниях» как о чем-то почти совершенно реальном. Нечто обязательно реальное лежит в основании изложенных представлений, именно предельно реальные, электродинамические, действительные флуктуации электрической пространственной плотности; ψ -функция должна позволить не больше и не меньше как описать математически совокупность этих флуктуаций с помощью одного дифференциального уравнения в частных производных. Мы должны здесь повторно отметить, что ψ -функция в общем случае не может и не должна быть прямо интерпретирована в трехмерном пространстве, как это сделано в случае одноэлектронной задачи, так как в общем случае она есть функция в пространстве конфигураций, а не в действительном пространстве*.

От любой весовой функции в изложенном выше смысле желательно потребовать, чтобы интеграл от нее по всему пространству конфигураций имел постоянное и неизменяющееся значение, лучше всего нормированное на единицу. В самом деле, легко убедиться, что это необходимо для того, чтобы согласно данному выше определению полный заряд системы оставался постоянным. Это требование, само собой разумеется, распространяется и на неконсервативные системы. Дело в том, что заряд системы, естественно, не должен изменяться, когда, например, падает световая волна, действует в течение некоторого времени и затем это действие опять прекращается. (NB: это имеет место также и для процесса ионизации. Отделенная от атома частица рассматривается сначала вместе с системой до тех пор, пока отделение час-

* Ann. Physik, 1926, 79, 526, 754 [с. 49, 73 наст. изд.].

тицы не будет совершенно также логически — расщеплением пространства конфигураций.)

Возникает вопрос, действительно ли при этом уравнением со временем (4'') с. 118, которому подчиняется функция ψ , гарантирована требуемая устойчивость нормировки. Если она не будет иметь места, то для всего нашего понимания это было бы большой катастрофой. К счастью, устойчивость имеет место. Образуем

$$\frac{d}{dt} \int \psi \bar{\psi} \rho dx = \int \left(\psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} + \bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \rho dx. \quad (37)$$

Мы знаем, что ψ удовлетворяет одному из двух уравнений (4''), а, следовательно, $\bar{\psi}$ — другому. Поэтому стоящий выше интеграл, рассматриваемый с точностью до умножения на постоянную, будет

$$\int (\psi \Delta \bar{\psi} - \bar{\psi} \Delta \psi) \rho dx = 2i \int (J \Delta R - R \Delta J) \rho dx, \quad (38)$$

где положено

$$\psi = R + iJ.$$

Интеграл (38) тождественно обращается в нуль согласно теореме Грина. Единственное условие, которому для этого должны удовлетворять функции R и J — достаточно быстро обращаться в нуль на бесконечности, — означает с физической точки зрения не что иное, как то, что рассматриваемая система практически ограничена конечной областью.

Предыдущее можно рассмотреть несколько иначе, так что не потребуется интегрировать по всему пространству конфигураций, а надо только преобразовать производную весовой функции в дивергенцию с помощью преобразования Грина. Таким способом можно получить картину отношения потоков прежде всего весовой функции, а через нее электрических процессов.

Умножим оба уравнения

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \frac{h}{4\pi i} \left(\Delta - \frac{8\pi^2}{h^2} V \right) \psi, \\ \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} &= -\frac{h}{4\pi i} \left(\Delta - \frac{8\pi^2}{h^2} V \right) \bar{\psi} \end{aligned} \quad (4'')$$

соответственно на $\rho \bar{\psi}$ и на $\rho \psi$ и сложим; получим

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \psi \bar{\psi}) = \frac{h}{4\pi i} \rho (\bar{\psi} \Delta \psi - \psi \Delta \bar{\psi}). \quad (39)$$

Для того чтобы провести преобразование правой части, надо вспомнить явную форму нашего многомерного неевклидова оператора Лапласа *:

* Ann. Physik, 1926, 79, 748, уравнение (31) [с. 68 наст. изд.]. Величина, обозначенная там через $\Delta_p^{-1/2}$, есть наша «весовая функция» $\rho(x)$ (например, $r^2 \sin \vartheta$ для полярных координат). T есть кинетическая энергия как функция координат положения и импульса; индекс у T означает производную по одной координате импульса. В уравнениях (31)

$$\rho\Delta = \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left[\rho T_{p_k} \left(q_l, \frac{\partial \psi}{\partial q_l} \right) \right]. \quad (40)$$

Легко найдем после простых преобразований:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho\psi\bar{\psi}) = \frac{h}{4\pi i} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left[\rho\bar{\psi} T_{p_k} \left(q_l, \frac{\partial \psi}{\partial q_l} \right) - \rho\psi T_{p_k} \left(q_l, \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial q_l} \right) \right]. \quad (41)$$

Правая часть является дивергенцией многомерного действительного вектора, который, очевидно, надо интерпретировать как плотность тока весовой функции в пространстве конфигураций. Уравнение (41) есть уравнение неразрывности для весовой функции. Из него может быть получено уравнение неразрывности электричества; оно имеет место для плотности заряда, которая «возникает из каждой точечной массы». Рассмотрим α -ю точечную массу; ее «заряд» — e_α , масса — m_α , ее координатное пространство пусть описывается через декартовы координаты $x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha$. Обозначим сокращенно через dx' произведение дифференциалов остальных координат. Проинтегрируем уравнение (41) по этим координатам при фиксированных $x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha$. При таком интегрировании в правой части выпадут все члены от третьего и выше и получится:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[e_\alpha \int \psi\bar{\psi} dx' \right] &= \frac{he_\alpha}{4\pi i m_\alpha} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[\int \left(\bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x_\alpha} - \psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x_\alpha} \right) dx' \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial y_\alpha} \left[\int \left(\bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial y_\alpha} - \psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial y_\alpha} \right) dx' \right] + \dots \right\} = \\ &= \frac{he_\alpha}{4\pi i m_\alpha} \operatorname{div}_\alpha \left[\int [\bar{\psi} \operatorname{grad}_\alpha \psi - \psi \operatorname{grad}_\alpha \bar{\psi}] dx' \right]. \end{aligned} \quad (42)$$

В этом уравнении div и grad имеют обычный трехмерный евклидов смысл и $x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha$ рассматриваются как декартовы координаты действительного пространства. Уравнение (42) есть уравнение неразрывности плотности заряда, который «связан с α -й точечной массой». Если аналогичным образом построить такие же уравнения для всех остальных точечных масс и сложить их, то получим общее уравнение неразрывности. Надо, естественно, обратить особое внимание на то, что, как всегда в таких случаях, рассмотрение интегралов правой части как компонент плотности тока отнюдь не является абсолютно обязательным, так как в них может войти бездивергентный вектор.

Для того чтобы привести пример, укажем, что для консервативной одно-электронной задачи получим, если ψ определено через

$$\psi = \sum_k c_k u_k e^{2\pi i \nu_k t + i \vartheta_k} \quad (c_k, \vartheta_k — \text{действительные постоянные}), \quad (43)$$

и (32) ошибочно дважды использован индекс k , один раз как индекс суммирования, а другой — как индекс аргумента функции.

плотность тока J

$$J = \frac{he_1}{2\pi m_1} \sum_{(k, l)} c_k c_l (u_l \text{grad } u_k - u_k \text{grad } u_l) \sin [2\pi (\nu_k - \nu_l) t + \vartheta_k - \vartheta_l]. \quad (44)$$

Известно, и это имеет место вообще для произвольной консервативной системы, что если возбуждено одно-единственное собственное колебание, то компоненты тока исчезают, и распределение электричества будет постоянным во времени; из последнего непосредственно видно, что $\psi\bar{\psi}$ остается постоянным во времени. Это выполняется еще и тогда, когда возбуждены многие собственные колебания, принадлежащие к одному и тому же собственному значению. При этом плотность тока более не исчезает, но, вообще говоря, существует стационарное распределение тока. Так как в невозмущенном нормальном состоянии всегда то или другое имеет место, то можно в известном смысле говорить о *возвращении к электростатической и магнитостатической модели атома*.

Вместе с тем отсутствие излучения в нормальном состоянии находит во всяком случае простое объяснение.

Я надеюсь и верю, что изложенные выше идеи окажутся полезными для объяснения магнитных свойств атомов и молекул и для объяснения электрического тока в твердых телах.

Определенная трудность, без сомнения, заключена еще в применении комплексных волновых функций. Если они принципиально неизбежны, а не являются только средством облегчить вычисления, то это будет означать, что существуют принципиально две функции, которые только вместе дают объяснение состояния системы. Это несколько несимпатичное следствие отпадает, как я полагаю, если ввести значительно более симпатичное представление, что состояние системы задается действительной функцией и ее производной по времени. То, что мы здесь не можем дать никакого более точного объяснения, связано с тем, что мы в паре уравнений (4'') имеем только суррогат — для вычислений во всяком случае чрезвычайно удобный — действительного волнового уравнения, которое, по всей вероятности, четвертого порядка [9]; установление его для неконсервативной системы мне, однако, не удалось.

Поступило 21 июня 1926 г.

О КОМПТОН-ЭФФЕКТЕ¹

Как известно, волновая теория света позволяет предсказывать на основе простых и весьма общих соображений, относящихся к фазе, все изменения частоты и нормали к волновой поверхности, не вдаваясь в какие-либо детали процесса. Я представляю себе эти соображения следующим образом: световая волна с фазой

$$2\pi\nu\left[t - \frac{n}{c}(\alpha x + \beta y + \gamma z)\right]$$

падает со стороны положительной полуоси z на плоскость xy , являющуюся границей раздела двух сред с показателями преломления n (для $z > 0$) и n' (для $z < 0$). Фазу преломленной волны возьмем в виде

$$2\pi\nu'\left[t - \frac{n'}{c}(\alpha'x + \beta'y + \gamma'z) + \delta\right]$$

и потребуем, чтобы при $z=0$ разность фаз была постоянной, т. е. не зависящей от x, y, t , что дает

$$\nu' = \nu, \quad n'\alpha' = n\alpha, \quad n'\beta' = n\beta,$$

т. е. закон преломления Снеллиуса. Эти соотношения настолько общи, что, например, остаются неизменными и для кристаллов. Их можно также без всяких оговорок применять к движущимся поверхностям раздела. Детальное рассмотрение электромагнитного процесса оказывается необходимым только в том случае, если представляют интерес и интенсивности (френелевские формулы для отражений).

Если предположить теперь, что в дебройлевских волнах мы имеем равносильное волновой оптике средство рассмотрения процессов, которые ранее трактовались исключительно как движения корпускул, то следует ожидать, что, основываясь на очень простых фазовых соображениях типа приведенных выше, мы сможем понять изменения направления и частоты эфирной волны при комптон-эффекте в их связи с изменением скорости электрона. Последнее изменение, согласно идее де Бройля, можно описать также как изменения направления и частоты некоторой волны — волны де Бройля. Подробное исследование волновой механики этого процесса, недавно успешно выпол-

¹ *E. Schrödinger. Ann. Physik, 1927, 82, 170. Перевод И. С. Алексеева.*

ненное В. Гордоном *, прежде всего требует определения интенсивностей [1]. Поскольку это является довольно длинной и сложной процедурой, следующее далее простое и наглядное рассмотрение, дающее все, кроме интенсивностей, может оказаться весьма полезным и желательным.

Мы будем отправляться от одного из выводов классической оптики. «Если в прозрачной однородной изотропной среде, показатель преломления которой зависит от ее плотности, световой луч с длиной волны λ пересекает волну сжатия (звуковую волну) с длиной волны Λ , то, как указал, основываясь на чисто классическом вычислении, Л. Бриллюэн **, этот световой луч частично испытает правильное отражение от плоскостей звуковой волны [2]. Между обеими длинами волн и углом отражения ϑ при этом имеет место следующее хорошо известное из теории отражения рентгеновских лучей соотношение Брэгга [3]:

$$2\Lambda \sin \vartheta = \lambda \quad (1)$$

для отражения первого порядка ($=\lambda$, а не $=k\lambda$). Это соотношение является приближенным, поскольку скорость света считается очень большой по сравнению со скоростью звука. Точнее говоря, здесь дело обстоит так же, как для движущегося зеркала, когда угол отражения не в точности равен углу падения, и луч света претерпевает доплеровское смещение. Поэтому в (1) следует также внести поправку, как будто речь идет о движущемся кристалле».

Эта выдержка взята из другой моей работы ***, в которой с удовлетворением констатировалось, что результат Бриллюэна можно получить также и в предположении квантового характера обмена энергией и импульсом между обеими волнами. В то время господствовало убеждение, что все наше объяснение природы в конечном счете должно строиться на квантовых балансах подобного рода; и всякий раз доставляло радость, когда какой-либо надежно установленный классический результат оказывалось возможным без особых хлопот перевести со старого базиса на новый. Здесь же мы пойдем, так сказать, обратным путем. Мы покажем, что, опираясь на упомянутый выше результат Бриллюэна, можно получить квантовомеханическое истолкование соотношения Комптона, которое является столь же простым, как и квантовое рассмотрение с помощью понятий энергии и импульса.

Плоская синусоидальная волна

$$\psi \sim e^{\frac{2\pi i}{h} \left[h\nu t - \frac{h \sqrt{\nu^2 - \nu_0^2}}{c} (\alpha x + \beta y + \gamma z) \right]}, \quad (2)$$

для которой

$$\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1, \quad \nu_0 = m_0 c^2 / h,$$

* W. Gordon. Z. Phys., 1926, 40, 117. Г-н Гордон был настолько любезен, что дал мне возможность просмотреть свою рукопись, которой я руководствовался в последующих простых рассуждениях, которые in pace лежат также в основе работы г-на Гордона.

** L. Brillouin. Ann. phys., 1923, 17, 88.

*** Phys. Z., 1924, 25, 89 [4].

удовлетворяет в свободном пространстве релятивистскому волновому уравнению, неоднократно предлагавшемуся в последнее время многими авторами *,

$$\Delta\psi - \frac{1}{c^2} \ddot{\psi} - \frac{4\pi^2\nu_0^2}{c^2} \psi = 0 \quad [5]$$

и сопоставляется, согласно де Бройлю, электрону, движущемуся в направлении α , β , γ с энергией $h\nu$. Отсюда хорошо известным способом можно вычислить

$$\frac{h\nu}{c}, \quad \frac{h\sqrt{\nu^2 - \nu_0^2}}{c} \cdot \alpha, \quad \frac{h\sqrt{\nu^2 - \nu_0^2}}{c} \cdot \beta, \quad \frac{h\sqrt{\nu^2 - \nu_0^2}}{c} \cdot \gamma,$$

что представляет собой компоненты 4-вектора «энергии-импульса» соответствующего электрона. С волновой точки зрения мы можем назвать этот вектор «4-вектором распространения» и взять его компоненты в качестве коэффициентов при $ct, -x, -y, -z$ в выражении для фазы (после замены множителя $2\pi/h$) произвольной плоской синусоидальной волны, будь то ψ -волна, эфирная или какая-либо другая волна.

Таким образом, «распространение» является чисто волновокинематическим понятием и обладает компонентами

$$\frac{h}{c} \cdot \text{частота}, \quad \frac{h\alpha}{\text{длина волны}}, \quad \frac{h\beta}{\text{длина волны}}, \quad \frac{h\gamma}{\text{длина волны}}, \quad (3)$$

где α, β, γ — направляющие косинусы волнового вектора. Для эфирной волны эти величины тоже совпадают с квантотеоретическими значениями энергии и импульса. Однако такого рода ссылка на квантовые величины должна служить лишь для того, чтобы облегчить нам впоследствии отождествление нашего результата с комптоновским — мы оперируем с чисто волновокинематическим понятием (3) распространения. Трехмерным вектором распространения мы, естественно, считаем пространственную проекцию, т. е. вектор (3) за исключением его первой компоненты.

Согласно всегда оправдывавшейся до сих пор гипотезе в волновой механике физический смысл имеет не сама ψ -функция, а квадрат ее абсолютной величины, который имеет смысл плотности электричества **. Единственная ψ -волна типа (2), следовательно, производит постоянное в пространстве и времени распределение плотности [6]. Однако если мы возьмем суперпозицию двух таких волн — константы второй пусть будут $\nu', \alpha', \beta', \gamma'$, — то легко видеть, что в результате их взаимодействия возникает «волна электрической плотности», вектор распространения которой представляет собой векторную разность векторов распространения ψ -волн, образующих суперпозицию.

* O. Klein. Z. Phys., 1926; 37, 895; E. Schrödinger. Ann. Physik, 1926, 81, 109; V. Fock. Z. Phys., 1926, 38, 242; Th. de Donder, H. van den Dungen. Compt. rend., 1926, 5, Juli; L. de Broglie. Compt. rend., 1926, 26, Juli; J. Kudar. Ann. Physik, 1926, 81, 632; W. Gordon, op. cit.

** Релятивистское уточнение этого утверждения (W. Gordon, см. выше) ничего не меняет в нашем случае.

Обозначая последние векторы символами A и A' , мы получим, следовательно, для волны плотности *

$$D = A - A'. \quad (4)$$

Эта волна плотности в нашем случае занимает место звуковой волны Бриллюэна. Если мы предположим, что от нее, как от движущегося зеркала, отражается световая волна, причем выполняются законы Брэгга, то, как будет показано ниже, наши четыре волны — две ψ -волны A и A' , а также падающая и отраженная световые волны — связаны между собой в точности

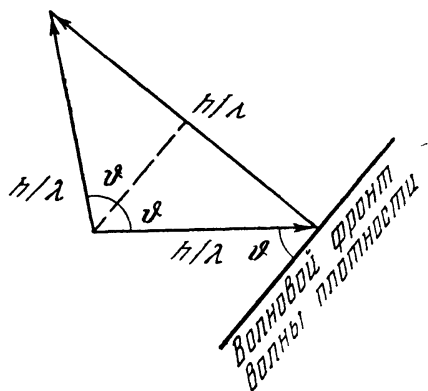


Рис. 1

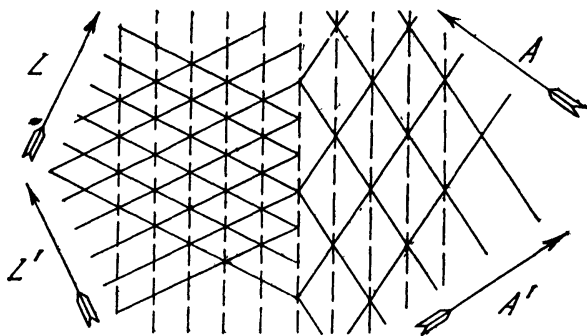


Рис. 2

соотношением Комптона. Отличие от бриллюэновского случая отражения на звуковой волне только количественное, поскольку скорость нашей волны плотности D , вообще говоря, не является малой по сравнению со скоростью света — она может принимать любые значения вплоть до скорости света (но никогда не может превысить последнюю, как легко показать).

Легко дать доказательство нашего утверждения. Для этого нам фактически вовсе не нужно исследовать отражение от движущегося зеркала. Поскольку все четыре волны и, конечно, также их векторы распространения инвариантны относительно преобразования Лоренца, мы можем с его помощью перейти к системе, где волна плотности будет покоиться. Первая (временная) компонента ее вектора распространения тогда обратится в нуль. Далее, частота (и длина волны) световой волны при отражении не меняются, т. е. временная компонента их векторов распространения остается при отражении неизменной. Наконец, точно выполняется соотношение Брэгга в форме (1), где λ — длина световой волны, Λ — длина волны плотности, ϑ — угол отражения. Это соотношение, таким образом, можно записать в виде

$$2\frac{h}{\lambda} \sin \vartheta = \frac{h}{\Lambda}. \quad (5)$$

Его смысл разъясняется на рис. 1, на котором также принято во внимание равенство угла отражения углу падения.

* Знак не имеет особого значения, так как он лишь меняет местами роли обеих ψ -волн.

Выражение (5) означает таким образом, что 3-вектор падающей световой волны, умноженный на 3-вектор волны D , равен 3-вектору отраженной волны. Но согласно сказанному выше аналогичное соотношение справедливо также и для временных компонент; для волны D такая компонента равна нулю, а для световой волны она остается при отражении неизменной. Обозначая через L и, соответственно, через L' 4-векторы распространения падающей и отраженной световых волн, мы можем объединить это в одном четырехмерном векторном уравнении *

$$L + D = L', \quad (6)$$

которое должно выполняться в произвольной четырехмерной системе координат. Комбинируя это уравнение с (4), получим

$$L + A = L' + A'. \quad (7)$$

Принимая во внимание смысл компонент L и L' , согласно представлению о световых квантах, и смысл компонент A и A' , согласно дебройлевскому сопоставлению ϕ -волн электронам, мы увидим, что уравнение (7) в точности совпадает с исходным пунктом комптоновской теории комптон-эффекта, основанной на понятиях энергии и импульса.

Весьма интересно отметить полную взаимность между ϕ -волнами, с одной стороны, и световыми волнами — с другой. Описанное явление с равным успехом можно представить как брэгговское отражение ϕ -волны на двух пересекающихся световых волнах, образующих систему интерференционных полос. В использовавшейся выше специальной системе координат эта система полос покоится, являясь идентичной системе стоячих волн O . Винера [7]. Соотношения (4) и (6) показывают, что система интерференционных полос и волна плотности совпадают, имея общий вектор распространения D . Выбранная нами координатная система является той же самой, которую уже использовал В. Паули ** для изучения комптон-эффекта и которая оказалась самой подходящей для этого.

Цель рис. 2 — представить соотношения между четырьмя взаимно проникающими волновыми фронтами и общей для них стоячей волной (пунктирные линии) в выбранной пространственно-временной системе. Чтобы не загромождать картины, слева изображены только два фронта световых волн, а справа — только два фронта ϕ -волн. Стрелками обозначены направления движения того волнового фронта, к которому эти стрелки перпендикулярны. Их длина не имеет никакого значения. При желании можно мысленно осуществить параллельный сдвиг середины рисунка так, чтобы гребни волн L' и A' в каждой точке касались вершин волн L и A . Брэгговское соотношение (1) для каждой из пар волн (L, L') и (A, A') в их отношении к стоячей волне как «кристаллу» легко можно вывести из рисунка. Таким образом, можно сказать: *законы комптон-эффекта для направления и частоты полностью совпадают с утверж-*

* Знак D в (6) не играет особой роли, так как он лишь меняет местами фигурирующие там ϕ -волны.

** W. Pauli jr. Z. Phys., 1923, 18, 272 [8].

дением, что участвующие в нем две световые и две ψ -волны связаны с одним и тем же «семейством сетчатых плоскостей» брэгговским соотношением для отражения первого порядка (обобщенным на случай движущегося кристалла); при этом упомянутое семейство может обладать произвольным начальным положением, произвольным расстоянием между плоскостями и произвольной (но меньшей скорости света) трансляционной скоростью.

Мне хотелось бы еще предупредить одно возможное возражение. Могут сказать: хорошо, но ведь в исходных данных о комптон-эффекте присутствует только одна световая волна и один определенным образом движущийся электрон, т. е., следовательно, одна ψ -волна. Откуда же тогда возьмется вторая, надлежащим образом подобранная ψ -волна, которая образует вместе с наперед заданной ψ -волной надлежащее «брэгговское зеркало» для наперед заданной световой волны? На это следует ответить, что для ответа на подобного рода вопросы тех простых фазовых соображений, которыми мы руководствовались здесь, конечно, совершенно недостаточно. Мы исследовали с их помощью то, что можно назвать эффектом Комптона для стационарного движения, при котором первичная волна одного вида всегда превращается благодаря отражению на системе интерференционных полос другого вида во вторичную волну, и наоборот. Мы точно так же поступаем при аналогичных рассуждениях в оптике — даже тогда, когда проводим исследование гораздо подробнее, руководствуясь подробной теорией. Здесь же мы, вообще говоря, также не исследуем, например, первое появление отраженной и преломленной волн на фронте первичной волны; мы осуществляем один и тот же подход не только к падающей, но также и ко всем другим волнам, появление которых можно предвидеть, и пытаемся с помощью этого подхода описать стационарное состояние, удовлетворяющее всем установленным требованиям.

Поступило 30 ноября 1926 г.

ЗАКОН СОХРАНЕНИЯ ЭНЕРГИИ-ИМПУЛЬСА ВОЛН МАТЕРИИ¹

Принцип Гамильтона, из которого можно получить точное релятивистское дифференциальное уравнение дебройлевских волн*, кажется, полностью оправдывает надежды, которые я возлагал на возможность органического слияния волновой механики с классической электродинамикой**. Если добавить к подынтегральному выражению («функции Лагранжа») хорошо известную функцию Лагранжа свободного от зарядов электромагнитного поля, $\mathfrak{H}^2 - \mathfrak{E}^2$, то получают одновременно (при варьировании помимо ϕ -функции также еще и потенциалов) четыре волновых уравнения для этих потенциалов с 4-током в качестве правой части, т. е. электродинамику как таковую. Этим мы обязаны отмеченному прежде всего Гордоном обстоятельству (см. в указанном месте), что функция Лагранжа волн де Бройля, продифференцированная по одной из компонент потенциала, дает соответствующую компоненту 4-тока. В качестве дальнейшего важного следствия получается закон сохранения энергии-импульса для всего поля, из которого можно усмотреть вклад зарядов, т. е. ϕ -функции, в тензор энергии-импульса. Для меня ясно, что все это каким-то образом должно содержаться в весьма общих рассматриваниях О. Клейна *** и де Дондера ****. Однако не представляется излишним получить указанные взаимосвязи (не обращаясь к теории тяготения и вызывающей интерес пятой координате) в возможно более простой форме, особенно учитывая огромную пропасть, которая все еще зияет между этой прекрасной замкнутой в себе теорией поля и опытом (см. заключение этой статьи).

Мы используем волновое уравнение и принцип Гамильтона в форме, предложенной Гордоном (см. в указанном месте). Первое выглядит следующим образом (по индексам, встречающимся дважды, производится суммирование всегда от 1 до 4):

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} + i\varphi_\alpha \right) \left(\frac{\partial}{\partial x_\alpha} + i\varphi_\alpha \right) - k^2 \right] \psi = 0, \quad (1)$$

причем здесь принято

$$x_1, x_2, x_3 = x, y, z; \quad x_4 = ict; \\ \varphi_1, \varphi_2, \varphi_3 = \frac{2\pi e}{hc} \mathfrak{A}_x, \mathfrak{A}_y, \mathfrak{A}_z; \quad \varphi_4 = \frac{2\pi e}{hc} iV; \quad k^2 = 4\pi^2 m_0^2 c^2 / h^2. \quad (2)$$

¹ E. Schrödinger. Ann. Physik, 1927, 82, 178. Перевод В. П. Визгина.

* O. Klein. Z. Phys., 1926, 37, 895; там же: V. Fock, 1926, 38, 242; J. Kudar. Ann. Physik, 1926, 81, 632; W. Gordon. Z. Phys., 1926, 40, 117.

** Ann. Physik, 1926, 79, 754.

*** В указанном месте.

**** Th. de Donder, H. van den Dungen. Compt. rend., 1926, 5, Juli.

$\mathcal{A}$, V — потенциалы; e , m_0 , c , $\hbar$ — известные универсальные постоянные; $i = \sqrt{-1}$.

Особенно следует подчеркнуть, что благодаря введению 4-векторов с мнимыми четвертыми компонентами релятивистские соотношения выступают незатушеванными. Это только формально-вычислительный прием, чтобы во всех четырех суммах не выписывать специально четвертый член из-за отличного от других его знака. Переход к комплексно-сопряженным величинам касается поэтому только явно фигурирующих i - и ψ -функций.

Уравнение (1), согласно Гордону (см. в указанном месте), можно вывести из четырехмерного интеграла Гамильтона с (действительной) функцией Лагранжа

$$L_m = (\psi_\alpha + i\varphi_\alpha\psi)(\bar{\psi}_\alpha - i\varphi_\alpha\bar{\psi}) + k^2\psi\bar{\psi}. \quad (3)$$

Черта означает комплексное сопряжение. Для сокращения принято

$$\psi_\alpha = \frac{\partial\psi}{\partial x_\alpha}, \quad \bar{\psi}_\alpha = \frac{\partial\bar{\psi}}{\partial x_\alpha}. \quad (4)$$

Индекс α следует читать после черты. При образовании вариационной производной, как заметил Гордон, ψ и $\bar{\psi}$ варьируются независимо. Легко убедиться в том, что это равносильно независимому варьированию действительной и мнимой частей ψ (а это является вполне естественным приемом). Таким образом, одна из вариационных производных [1] имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\frac{\partial L_m}{\partial \bar{\psi}_\alpha} \right) - \frac{\partial L_m}{\partial \bar{\psi}} = 0, \quad (5)$$

совпадающий с (1); другая не дает ничего нового. Если (5) умножить на $\bar{\psi}$, то легко получить

$$\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\bar{\psi} \frac{\partial L_m}{\partial \bar{\psi}_\alpha} \right) = \bar{\psi}_\alpha \frac{\partial L_m}{\partial \bar{\psi}_\alpha} + \bar{\psi} \frac{\partial L_m}{\partial \bar{\psi}} = L_m, \quad (6)$$

поскольку L_m — однородная функция 1-й степени $\bar{\psi}$ и $\bar{\psi}_\alpha$. При переходе к комплексно-сопряженным величинам правая часть не изменится, и в результате вычитания получается

$$\frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left(\bar{\psi} \frac{\partial L_m}{\partial \bar{\psi}_\alpha} - \psi \frac{\partial L_m}{\partial \psi_\alpha} \right) = 0. \quad (7)$$

Это, согласно Гордону, уравнение непрерывности электричества.

Таким образом, можно записать

$$\bar{\psi} \frac{\partial L_m}{\partial \bar{\psi}_\alpha} - \psi \frac{\partial L_m}{\partial \psi_\alpha} = i \frac{\partial L_m}{\partial \varphi_\alpha}. \quad (8)$$

Обозначим 4-ток

$$s_\alpha = -\lambda \frac{\partial L_m}{\partial \varphi_\alpha}, \quad (9)$$

где λ — некоторая, еще подлежащая выбору универсальная действительная постоянная. Под s_α будем подразумевать четверку величин, фигурирующих в лоренцевой теории

$$s_1, s_2, s_3 = \rho \frac{v}{c}, \quad s_4 = i\rho [^2]. \quad (10)$$

Теперь дополним нашу функцию Лагранжа (3) таким образом, чтобы из нее варьированием φ_α получались уравнения электромагнитного поля, что возможно вследствие (9). Положим

$$L_e = \frac{1}{4} f_{\alpha\beta} f_{\alpha\beta} = \frac{1}{4} \left(\frac{\partial \varphi_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_\beta} \right) \left(\frac{\partial \varphi_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_\beta} \right), \quad (11)$$

где принято сокращение

$$f_{\alpha\beta} = \frac{\partial \varphi_\beta}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_\beta}. \quad (12)$$

Согласно (2) и известным формулам обозначим

$$\begin{aligned} f_{14} &= -\frac{2\pi e}{hc} i\mathfrak{E}_x, \quad f_{24} = -\frac{2\pi e}{hc} i\mathfrak{E}_y, \quad f_{34} = -\frac{2\pi e}{hc} i\mathfrak{E}_z; \\ f_{23} &= \frac{2\pi e}{hc} \mathfrak{S}_x, \quad f_{31} = \frac{2\pi e}{hc} \mathfrak{S}_y, \quad f_{12} = \frac{2\pi e}{hc} \mathfrak{S}_z, \end{aligned} \quad (13)$$

где $\mathfrak{E}$, $\mathfrak{S}$ — поле в обычных единицах. Теперь возьмем в качестве функций Лагранжа

$$L = L_m + L_e \quad (14)$$

и получим посредством варьирования φ_β

$$\frac{\partial f_{\alpha\beta}}{\partial x_\alpha} = \frac{\partial L}{\partial \varphi_\beta} = -\frac{s_\beta}{\lambda}. \quad (15)$$

При значении постоянной

$$\lambda = \frac{hc}{8\pi^2 e}$$

уравнение (15) представляет собой вторую четверку уравнений Максвелла — Лоренца, в то время как первая четверка вследствие (12) удовлетворяется тождественно. С учетом (12) и дополнительного максвелловского условия $\left(\frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial x_\alpha} = 0\right)$ уравнение (15) переходит в волновые уравнения для потенциала

$$\frac{\partial^2 \varphi_\beta}{\partial x_\alpha \partial x_\alpha} = -\frac{s_\beta}{\lambda}. \quad (15')$$

Из (15') и дополнительного максвелловского условия [3] легко получается, что

$$\frac{\partial T_{\rho\sigma}}{\partial x_\sigma} = -\frac{f_{\rho\sigma} s_\sigma}{\lambda}, \quad (16)$$

где

$$T_{\rho\sigma} = f_{\rho\alpha} f_{\sigma\alpha} - \delta_{\rho\sigma} L_e \quad (17)$$

— известный максвелловский тензор напряжений-энергии-импульса (с точностью до некоторой универсальной постоянной). Правая часть в (16) означает у Лоренца энергию и импульс, переданные электронам полем. Эта правая часть теперь посредством (9) и волнового уравнения для ψ -функции (5) может быть представлена в виде дивергенции некоторого тензора, а именно тензора энергии-импульса заряда (или «материи»). Прежде всего получаем

$$-\frac{f_{\rho\sigma} s_\sigma}{\lambda} = \left(\frac{\partial \varphi_\sigma}{\partial x_\rho} - \frac{\partial \varphi_\rho}{\partial x_\sigma} \right) \frac{\partial L_m}{\partial \varphi_\sigma} = \frac{\partial L_m}{\partial \varphi_\sigma} \cdot \frac{\partial \varphi_\sigma}{\partial x_\rho} - \frac{\partial}{\partial x_\sigma} \left(\varphi_\rho \frac{\partial L_m}{\partial \varphi_\sigma} \right), \quad (18)$$

последнее — вследствие отсутствия источников 4-тока (уравнение (7) с учетом (8)). Далее вычисляем

$$\frac{\partial L_m}{\partial x_\rho} = \frac{\partial L_m}{\partial \varphi_\sigma} \cdot \frac{\partial \varphi_\sigma}{\partial x_\rho} + \frac{\partial L_m}{\partial \bar{\psi}} \bar{\psi}_\rho + \frac{\partial L_m}{\partial \psi} \psi_\rho + \frac{\partial L_m}{\partial \bar{\psi}_\sigma} \cdot \frac{\partial \bar{\psi}_\sigma}{\partial x_\rho} + \frac{\partial L_m}{\partial \psi_\sigma} \cdot \frac{\partial \psi_\sigma}{\partial x_\rho}. \quad (19)$$

Но так как согласно (4)

$$\frac{\partial \psi_\sigma}{\partial x_\rho} = \frac{\partial \psi_\rho}{\partial x_\sigma} \quad (20)$$

и т. д., то допустимо некоторое преобразование двух последних членов, аналогичное тому, которое проводится при интегрировании по частям, в результате чего вследствие (5) четыре члена в правой части (19) исчезают. Тогда получается

$$\frac{\partial L_m}{\partial x_\rho} = \frac{\partial L_m}{\partial \varphi_\sigma} \cdot \frac{\partial \varphi_\sigma}{\partial x_\rho} + \frac{\partial}{\partial x_\sigma} \left(\bar{\psi}_\rho \frac{\partial L_m}{\partial \bar{\psi}_\sigma} + \psi_\rho \frac{\partial L_m}{\partial \psi_\sigma} \right). \quad (21)$$

Это выражение мы вычитаем из уравнения (18) и находим

$$\begin{aligned} -\frac{f_{\rho\sigma} s_\sigma}{\lambda} &= \frac{\partial L_m}{\partial x_\rho} - \frac{\partial}{\partial x_\sigma} \left(\bar{\psi}_\rho \frac{\partial L_m}{\partial \bar{\psi}_\sigma} + \psi_\rho \frac{\partial L_m}{\partial \psi_\sigma} + \varphi_\rho \frac{\partial L_m}{\partial \varphi_\sigma} \right) = \\ &= \frac{\partial}{\partial x_\sigma} \left(\delta_{\rho\sigma} L_m - \bar{\psi}_\rho \frac{\partial L_m}{\partial \bar{\psi}_\sigma} - \psi_\rho \frac{\partial L_m}{\partial \psi_\sigma} - \varphi_\rho \frac{\partial L_m}{\partial \varphi_\sigma} \right) = -\frac{\partial S_{\rho\sigma}}{\partial x_\sigma}, \end{aligned} \quad (22)$$

введя при этом тензор энергии зарядов или «материи»

$$S_{\rho\sigma} = \bar{\psi}_\rho \frac{\partial L_m}{\partial \bar{\psi}_\sigma} + \psi_\rho \frac{\partial L_m}{\partial \psi_\sigma} + \varphi_\rho \frac{\partial L_m}{\partial \varphi_\sigma} - \delta_{\rho\sigma} L_m. \quad (23)$$

Из (16) и (22) следует

$$\frac{\partial}{\partial x_\sigma} (T_{\rho\sigma} + S_{\rho\sigma}) = 0 \quad (24)$$

в качестве объединенного закона сохранения энергии и импульса для электромагнитного поля и дебройлевского волнового поля.

Вычисление показывает, что тензор $S_{\rho\sigma}$ симметричен. Легко найти его явное выражение

$$S_{\rho\sigma} = \bar{\psi}_\rho \psi_\sigma + \bar{\psi}_\sigma \psi_\rho + i\varphi_\sigma (\bar{\psi}_\rho \psi - \psi_\rho \bar{\psi}) + i\varphi_\rho (\bar{\psi}_\sigma \psi - \psi_\sigma \bar{\psi}) + 2\bar{\psi}\bar{\varphi}_\rho\varphi_\sigma - \delta_{\rho\sigma}L_m, \quad (25)$$

или также следующее выражение, которое более тесно связано с формой L_m , представленной соотношением (3):

$$S_{\rho\sigma} = (\psi_\rho + i\varphi_\rho\psi)(\bar{\psi}_\sigma - i\varphi_\sigma\bar{\psi}) + (\psi_\sigma + i\varphi_\sigma\psi)(\bar{\psi}_\rho - i\varphi_\rho\bar{\psi}) - \delta_{\rho\sigma}L_m. \quad (25')$$

Скаляр Лауэ [4] (диагональная сумма) $S_{\sigma\sigma}$ в отличие от $T_{\sigma\sigma}$ не исчезает. Более того, легко получить

$$S_{\sigma\sigma} = -2(L_m + k^2\bar{\psi}\bar{\psi}). \quad (26)$$

Объединенный тензор допускает еще следующее хорошо известное представление посредством объединенной функции Лагранжа:

$$\begin{aligned} T_{\rho\sigma} + S_{\rho\sigma} = & \frac{\partial L}{\partial\left(\frac{\partial\varphi_\rho}{\partial x_\alpha}\right)} \cdot \frac{\partial\varphi_\sigma}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial L}{\partial\left(\frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial x_\rho}\right)} \cdot \frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial x_\sigma} + \frac{\partial L}{\partial\bar{\psi}_\rho} \bar{\psi}_\sigma + \\ & + \frac{\partial L}{\partial\psi_\rho} \psi_\sigma + \frac{\partial L}{\partial\varphi_\rho} \varphi_\sigma - \delta_{\rho\sigma}L, \end{aligned} \quad (27)$$

которое аналогично представлению гамильтоновой функции через функцию Лагранжа в механике точки. Следует напомнить, что наши тензорные компоненты $S_{\rho\sigma}$ и $T_{\rho\sigma}$ имеют физическую размерность см^{-4} . Их нужно перед использованием умножить на постоянную

$$\frac{\hbar^2 c^2}{32\pi^3 e^2},$$

имеющую размерность квадрата заряда, чтобы представить физическую энергию, импульс и напряжения (NB: дальнейшие дефекты размерности устраняются, как известно, умножением на степени c).

На вопрос о том, соответствует ли действительности эта самосогласованная теория поля общепринятым образом — даже если не принимать пока во внимание собственный момент импульса электронов, — следует ответить отрицательно [5]. Расчет конкретных случаев, прежде всего для атома водорода, показывает, что в волновое уравнение (1) следует подставлять не те потенциалы, которые следуют из уравнений (15') с выражением для 4-тока (9). Скорее всего в этом случае следует задаваться определенными значениями потенциалов ядра и возможных «внешних» полей и затем решать уравнение (1) относительно ψ . Из (9) затем вычисляется распределение тока, «генерированного» ψ , а из него согласно (15') порожденные им потенциалы. Они оказываются тогда, в дополнение к заданным потенциалам, теми потенциалами, с которыми атом взаимодействует как целое. Может получиться, таким образом (при надлежащей нормировке ψ , полевое обоснование которой отсутствует), с одной стороны, нейтрализация заряда ядра на больших расстоя-

ниях, с другой — излучение. Что касается доступного нам опыта, а эти вновь найденные потенциалы следует теперь подставить в уравнение (1) и вычислить «второе приближение», то об этом можно сказать так: с потенциалом нейтрализации нельзя поступить подобным образом, при этом полностью изменились бы значения термов, поэтому необходимо сделать ряд дальнейших приближений, которые, если вообще этот метод обеспечивает сходимость, все равно не могут объяснить действительные термы атома водорода и тем более термы атома гелия (при заряде ядра 2). Напротив, если действовать описанным образом с потенциалами излучения, то можно получить фактически коррекцию излучения *, по меньшей мере, тогда, когда принято, что некоторое собственное колебание возбуждается достаточно сильно, а остальные — весьма слабо.

Именно замкнутость полевых уравнений тем самым оказывается определенным образом нарушенной. В настоящее время это еще, пожалуй, нельзя полностью понять, но можно связать со следующими двумя обстоятельствами.

1. Обмен энергией и импульсом между электромагнитным полем и «материей» осуществляется в действительности не непрерывным образом, как это позволяет думать соотношение (24), имеющее место для поля.

2. В теории Лоренца в уравнение движения отдельного электрона также следует вводить лишь поля остальных электронов, но не собственное его поле. Обратное воздействие последнего в основном уже учтено при построении уравнений движения в качестве электромагнитной массы. Этому соответствует в уравнении (1) член с k^2 . Во втором приближении из обратного действия собственного поля также и в теории Лоренца получается сила реакции излучения.

Вопрос о том, можно ли найти решение этой проблемы лишь в предложенной недавно несколькими авторами ** статистической интерпретации теории поля, мы вынуждены, пожалуй, оставить пока открытым. Мне лично эта интерпретация в настоящее время больше *** не представляется окончательной и вполне удовлетворительной. Она, как мне кажется, означает принципиальный отказ от понимания индивидуальных процессов.

Заслуживает упоминания одна отрадная сторона описанной трудности. Тем, что природа нарушает своим поведением замкнутость системы полевых уравнений, она поразительным образом вступает в противоречие с нашими математическими возможностями: уже теория атома водорода стала бы математически необозримо запутанной, если бы φ_α в уравнении (1) означали не заданные значения потенциалов, а к ним нужно было бы добавить потенциалы, которые вычисляются из отыскиваемого вначале решения ψ посредством (9) и (15').

Поступило 10 декабря 1926 г.

* Ср.: Ann. Physik, 1926, 81, 129 и след. [6].

** M. Born. Z. Phys., 1926, 38, 803; 1926, 40, 167; P. A. M. Dirac. Proc. Roy. Soc., 1926, A112, 661; также: W. Gordon [7].

*** Ср.: Naturwissenschaften, 1924, 12, 720.

ОБМЕН ЭНЕРГИЕЙ В ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКЕ¹

Данная заметка непосредственно следует за серией статей *, появившихся в «Annalen der Physik». Мы применяем здесь «волновую механику» в многомерной форме, которая почти полностью изложена в этой серии и согласуется с квантовой механикой Гейзенберга—Дирака. Однако это согласование относится не к той четырехмерной форме ** (или пятимерной по О. Клейну), которая соответствует первоначальной концепции де Бройля. Эта форма, быть может, лучше раскрывает суть вещей, но пока она является лишь программой, так как с помощью ее еще не удалось сформулировать многоэлектронную задачу. Я позволю себе здесь по-новому изложить некоторые важные вопросы, которые с иной точки зрения уже освещались (Гейзенбергом, Дираком, Иорданом). Этим я хотел бы добиться понимания также со стороны тех, которые еще не приобрели навыков в применении новых систем исчисления (матрицы, q -числа), использовавшихся указанными авторами ***.

§ 1. Метод вариации постоянных ****

Для решенной в Q III (§ 1 и 2) проблемы возмущений были с того времени для многих задач разработаны более общие ***** , более продуманные методы. Рассмотрим консервативную систему, волновое уравнение которой (Q IV, уравнение (4''))

$$\Delta\phi - \frac{8\pi^2}{h^2} V\phi - \frac{4\pi i}{h} \dot{\phi} = 0 \quad (1)$$

¹ E. Schrödinger. Ann. Physik, 1927, 82, 186. Перевод А. М. Погали.

* Quantisierung als Eigenwertproblem. — Ann. Physik, 1926, 79, 361, 489; 80, 437; 81, 109 (сообщения I—IV, впредь будет цитироваться Q I—IV).

** O. Klein. Z. Phys., 1926, 37, 895; W. Gordon. Ibid., 1926, 40, 117; Q IV, 131; E. Schrödinger. Ann. Physik, 1927, 82, 257, 265 и др.

*** В общем, испытываемое затруднение можно, пожалуй, сравнить со следующим. Если кто-то, например, в лекции сначала развил старую теорию дальнего действия электричества в декартовых координатах, а затем при переходе к теории Максвелла одновременно ввел бы впервые векторное исчисление, то для слушателя было бы довольно трудно найти различие между физически новым содержанием и новой формой. Так, например, у П. А. М. Дирака (Proc. Roy. Soc., A14, 250, § 3) легко можно не заметить, что им вводится совершенно новая физическая гипотеза, а именно «прогрессивно нарастающее» или «удваивающееся» применение того процесса, который Гейзенберг называет «переходом к матрицам», Дирак — «переходом к q -числам», я — «переходом к волновой механике».

**** P. A. M. Dirac. Proc. Roy. Soc., 1926, A112, 674.

***** См. особенно: M. Born. Z. Phys., 1926, 40, 172.

имело бы нормированные частные решения

$$\psi_k e^{\frac{2\pi i E_k t}{h}}, \quad (2)$$

где ψ_k зависит только от координат системы *. Функция ψ_k удовлетворяет, следовательно, уравнению

$$\Delta \psi_k + \frac{8\pi^2}{h^2} (E_k - V) \psi_k = 0, \quad (3)$$

которое не зависит от времени. Общее решение уравнения (1) имеет вид

$$\psi = \sum_k c_k \psi_k e^{\frac{2\pi i E_k t}{h}}, \quad (4)$$

где c_k — произвольные, вообще говоря, комплексные постоянные, которые мы называем амплитудами (квадраты их абсолютных значений для краткости будем называть квадратами амплитуд).

Внесем теперь небольшое, постоянное во времени, возмущение, заменяя в уравнении (1) V на $V+r$, где r — малая функция одних только координат. Постараемся возмущенному таким образом уравнению снова удовлетворить посредством (4), рассматривая амплитуды как медленно меняющиеся функции времени. Для такой зависимости от времени, подставляя (4) в возмущенное уравнение (1) и принимая во внимание (3), получим

$$-\frac{8\pi^2}{h^2} r \sum_k c_k \psi_k e^{\frac{2\pi i E_k t}{h}} - \frac{4\pi i}{h} \sum_k \dot{c}_k \psi_k e^{\frac{2\pi i E_k t}{h}} = 0. \quad (5)$$

В качестве необходимого и достаточного условия для обращения в нуль левой части воспользуемся требованием, чтобы она была ортогональна к каждой функции ψ_l полной ортогональной системы. Так мы получим бесчисленное множество уравнений

$$\dot{c}_l = \frac{2\pi i}{h} \sum_k \varepsilon_{kl} c_k e^{\frac{2\pi i (E_k - E_l) t}{h}}, \quad (6)$$

где

$$\varepsilon_{kl} = \int r \psi_k \psi_l dx. \quad (7)$$

Уравнение (6) при этом выполняется все еще строго.

Если теперь все разности собственных значений будут большими по сравнению с «элементами матрицы возмущения» ε_{kl} , то каждую амплитуду c_k ($k \neq l$) можно считать почти постоянной в течение периода изменения экспоненциального фактора, на который она умножается. Таким образом,

* Волновая функция ψ должна считаться существенно комплексной. Функции координат ψ_k только для упрощения формул считаем действительными.

все эти элементы оказывают только небольшие осциллирующие возмущения на c_l . Это не относится лишь к члену суммы с $k=l$, так как для него экспоненциальный множитель равен единице. Не принимая во внимание таких малых отклонений, имеем

$$\dot{c}_l = \frac{2\pi i}{h} \varepsilon_{ll} c_l, \quad c_l = c_l^0 e^{\frac{2\pi i \varepsilon_{ll} t}{h}}. \quad (8)$$

Итак, величины амплитуд в общем не изменяются (в этом приближении), но их фазы испытывают секулярные изменения (которые можно также истолковывать как возмущения собственных значений, см. Q III).

Напротив, если в невозмущенной системе встречаются разности собственных значений, которые сравнимы с величинами возмущения ε_{kl} или совсем малы по сравнению с ними, то амплитуды всех тех собственных колебаний, которые входят в состав такой группы смежных собственных значений, так связаны друг с другом посредством уравнений (6) в рассмотренном до сих пор приближении, что уже не отдельный квадрат амплитуды остается постоянным, а только их сумма. Для того чтобы это показать, остановимся, в частности, на случае α -кратного собственного значения. Пусть c_l будет амплитуда собственного колебания, относящегося к этому случаю. Тогда в правой части уравнения (6) α экспоненциальных величин будут равны единице и в рассматриваемом приближении остаются α секулярных членов, а именно как раз амплитуды, которые относятся к тому же самому собственному значению. Точно так же обстоит дело со всеми α уравнениями (6), в которых слева фигурирует одна из этих амплитуд. Таким образом, мы получаем для их определения конечную, замкнутую систему уравнений

$$\dot{c}_l = \frac{2\pi i}{h} \sum_{k=1}^{\alpha} \varepsilon_{kl} c_k, \quad l = 1, 2, \dots, \alpha, \quad (9)$$

в которой α рассматриваемых амплитуд пронумерованы для простоты как 1, 2, ..., α . Сообразно с этими уравнениями имеет место обмен между амплитудами, принадлежащими одному и тому же собственному значению, и (в рассматриваемом приближении) только между такими. Умножая (9) на комплексно-сопряженную амплитуду c_l^* , взяв действительную часть и произведя суммирование по всем l , получим (вследствие симметрии ε_{kl}) справа нуль, т. е.

$$\sum_{l=1}^{\alpha} c_l \dot{c}_l^* = \text{const} \quad (10)$$

будет интегралом системы уравнений (9). Впрочем уравнения (9) обычно очень легко интегрируются, так как ε_{kl} в любом случае постоянны. При этом мы приходим точь-в-точь к преобразованию по главным осям, данному в Q III, с. 87. Решение совпадает с приведенным там «решением задачи возмущения в нулевом приближении», которое связано с данными «возмущенными собственными значениями в первом приближении».

§ 2. Волновомеханическое объяснение квантованного обмена энергией

Только что описанная, в высшей мере простая, суть вопроса дает ныне, как отметили Гейзенберг * и Иордан **, волновомеханическое объяснение факта, который, пожалуй, может быть охарактеризован как эмпирический фундамент квантовой теории. Речь идет о том, что, по-видимому, физические системы только тогда оказывают влияние друг на друга, когда они согласовываются или приближенно согласовываются относительно «разности уровней». Это влияние постоянно касается четырех критических уровней и всегда таким образом, что одна из двух систем смещается по направлению к своему высшему уровню за счет другой, которая испытывает «эквивалентное» противоположное смещение.

Если мы имеем две системы с волновыми уравнениями

$$\Delta_1 \psi - \frac{8\pi^2}{h^2} V_1 \psi - \frac{4\pi i}{h} \dot{\psi} = 0 \quad (11)$$

(собственным функциям ψ_k соответствуют собственные значения E_k) и

$$\Delta_2 \varphi - \frac{8\pi^2}{h^2} V_2 \varphi - \frac{4\pi i}{h} \dot{\varphi} = 0 \quad (12)$$

(собственным функциям φ_l соответствуют собственные значения F_l) и объединяем их сначала мысленно («при исчезающей связи») в одну систему, то ее волновое уравнение, как нетрудно сообразить, будет

$$(\Delta_1 + \Delta_2) \Psi - \frac{8\pi^2}{h^2} (V_1 + V_2) \Psi - \frac{4\pi i}{h} \dot{\Psi} = 0. \quad (13)$$

При этом собственным функциям $\psi_k \varphi_l$ соответствуют собственные значения $E_k + F_l$.

Добавим теперь к $V_1 + V_2$ (см. § 1) небольшой член связи g . Тогда вопрос сводится к тому, возникают ли благодаря воображаемой связи новые вырождения или приближенные вырождения (т. е. многократные или близлежащие друг к другу собственные значения) или нет. Если это не происходит, т. е. все собственные значения $E_k + F_l$ достаточно сильно различаются между собой, то обе системы в первом приближении, рассмотренном в § 1, не оказывают влияния друг на друга. Если же в (13) возникают новые вырождения, то происходит секулярный обмен амплитуд.

Пусть, например, для четырех частных значений k, k', l, l'

$$E_k + F_{l'} = E_{k'} + F_l \quad (14)$$

(это значит как раз, что обе системы согласуются относительно разности собственных значений $E_k - E_{k'} = F_l - F_{l'}$). В таком случае к собственному

* W. Heisenberg. Z. Phys., 1926, 38, 411; 1926, 40, 501.

** P. Jordan. Ibid., 1927, 40, 661.

значению (14) относятся две собственные функции

$$\psi_k \varphi_{l'} \quad \text{и} \quad \psi_{k'} \varphi_l. \quad (15)$$

Если c_1, c_2 — их амплитуды, то между ними согласно уравнениям

$$\dot{c}_1 = \frac{2\pi i}{h} (\varepsilon_{11} c_1 + \varepsilon_{12} c_2), \quad \dot{c}_2 = \frac{2\pi i}{h} (\varepsilon_{12} c_1 + \varepsilon_{22} c_2) \quad (16)$$

наступает обмен, причем константы ε_{ik} определяются путем соответствующего применения уравнения (7).

Очевидно, при таких обстоятельствах необходимо, например, увеличение амплитуды, относящейся к $\psi_k \varphi_l$, за счет другой интерпретировать двояко, поскольку как в первой системе амплитуда функции ψ_k возрастает за счет амплитуды функции $\psi_{k'}$, так и в другой системе амплитуда функции $\varphi_{l'}$ возрастает за счет амплитуды функции φ_l . Это можно представить себе таким образом, что волновая функция общей системы описывает в любой момент как состояния первой системы (если не принимать во внимание небольшую связь и наличие второй системы), так и наоборот. Разумеется, в качестве амплитуд выступают тогда уже не простые числа, а линейные комбинации собственных функций другой системы, которая, согласно современному пониманию представляется полностью отличной от первых двух. Однако это не вносит каких-либо осложнений. При расчете какой-нибудь из этих систем рассматриваемую систему соответствующих физических величин можно просто проинтегрировать по координатам другой системы подобно тому, как это было описано в QIV, § 7. Таким образом, например, находят для квадрата амплитуды функции φ_l сумму квадратов амплитуд всех тех собственных функций общей системы, которые содержат φ_l *.

Следовательно, мы приходим к выводу, что, не предполагая дискретных уровней энергии и квантованного обмена энергии и даже вообще не рассматривая другого смысла собственных значений, кроме как частот, все же можно просто объяснить то, что физическое взаимодействие происходит в подавляющем большинстве случаев между такими системами, в которых соответственно более старым взглядам «имеется один и тот же элемент энергии». Речь идет, как уже отмечает Гейзенберг, о простом явлении резонанса с биениями подобно так называемому «симпатическому маятнику» [1]. Без квантовых постулатов достигают совершенно таких же результатов, как если бы квантовые постулаты были заданы. Эта «как если бы»-ситуация («Als ob»-Situation) для нас не нова. Так, самопроизвольно испускаемые частоты оказываются такими, как если бы собственные значения являлись дискретными уровнями энергии и выполнялось условие частот Бора.

* В рамках применяемого здесь простого способа вычисления мы не освобождаемся окончательно от чужих собственных функций, т. е. комплексная амплитуда φ_l в изолированной системе не может быть представлена просто. Это неудобство, как кажется, заключено в сущности вещей. Именно реальное ослабление связи невозможно без того, чтобы не существовала дальнейшая система — излучение (или «эфир»). Члены кулоновского взаимодействия перестают правильно описывать положение вещей задолго до того, как они становятся пренебрежимо малыми и должны быть заменены радиационным взаимодействием.

Не принуждает ли нас это к крайней осторожности в отношении принципов исследования, считавшихся обычно правильными, я хотел бы сказать даже — почти к недоверию по отношению к квантовым постулатам, если даже не обращать внимания на их аксиоматическую неясность? Психологически это ясно: как только однажды установилось понимание «термов» как дискретных уровней энергии, в каждом новооткрытом явлении обмена стали видеть подтверждение этого понимания, даже если в природе на самом деле ничего больше не существует, кроме только что рассмотренного явления резонанса. Мне возражат: понимание термов именно как уровней энергии подтверждается, во всяком случае, опытами по столкновению электронов; в том, что ускоряющая разность потенциалов измеряет кинетическую энергию отдельного электрона, вы все же не будете сомневаться? На это я отвечаю: все же я сомневаюсь, не является ли более правильным выдвигать на передний план частоту дебройлевской волны, чем понятие «кинетическая энергия отдельного электрона». Как известно, для этих волн при быстром прохождении разности потенциалов получается изменение частоты, которое точно соответствует достигнутой кинетической энергии. Из волнового уравнения также следуют точно те отклоненные траектории, которые мы действительно наблюдаем при определенном отношении e/m и скорости v .

Я не могу отделаться от ощущения, что допускать квантовые постулаты наряду с явлением резонанса — значит принимать два объяснения одного и того же вопроса. Но с этим дело обстоит как и с извинениями: одно из них непременно фальшивое, а чаще всего — оба. В последнем параграфе мы добавим к обсужденной здесь «как если бы»-ситуации еще одну [2].

§ 3. Статистическая гипотеза [3]

Если пытаются из уравнений (9) получить заключение о среднем распределении амплитуд при продолжительном взаимодействии, то это удастся, так же как и в аналогичном случае классической механики, только при введении дополнительной гипотезы статистического характера. Совершенно так же, как основные уравнения механики, уравнения (9) не изменяются с изменением знака времени, так что изменение может быть скомпенсировано посредством замены i на $-i$ (изменение знака всех фаз, соответствующее изменению знака всех скоростей в классической механике). Это уже показывает, что явлению резонанса не присуща никакая «выравнивающая тенденция». В самом деле, расчет показывает, что средние по времени значения квадратов амплитуд в общем зависят от своих начальных значений. Чтобы получить статистические заключения, необходима, таким образом, гипотеза об априорной вероятности начальных значений. Оказывается, что возможна только одна гипотеза, если выдвинуть такие требования:

- 1) гипотеза должна быть независима от момента времени, для которого она высказана, т. е. вероятность определенных значений амплитуд вследствие действия уравнений (9) не должна изменяться с течением времени;
- 2) она не должна зависеть от того, для какой из бесконечно многих, полностью эквивалентных ортогональных систем, которые получаются не-

зависимо друг от друга посредством любой ортогональной подстановки внутри собственных функций, относящихся к одному и тому же собственному значению, она высказана (см. Q III, с. 84).

Легко убедиться в том, что при таких требованиях невозможно никакое другое предположение, кроме как: плотность вероятности в пространстве, в котором в качестве прямоугольных координат взяты действительная и мнимая части амплитуд, является функцией лишь сумм квадратов амплитуд, относящихся к численно разным собственным значениям.

Это предположение приводит к тому, что средние значения квадратов амплитуд, относящихся к тем же собственным значениям, в силу симметрии становятся равными друг другу, или же что каждая частичная их сумма пропорциональна числу членов суммы. В дальнейшем мы будем применять только это следствие, а именно только для случаев с чрезвычайно сильным вырождением и только для частичных сумм с чрезвычайно большим числом членов.

Необходимо, пожалуй, отказаться от попытки представить эти средние значения в качестве настоящего среднего по времени посредством чего-нибудь аналогичного квазиэргодической гипотезе. Уравнения (9) являются слишком прозрачными, чтобы мириться с подобной гипотезой (они содержат по меньшей мере α независимых голоморфных интегралов, т. е. квадратов амплитуд «нормальных колебаний»). Случай совершенно аналогичен идеализированному твердому телу, для которого постоянство квадратов амплитуд нормальных колебаний в сущности, как кажется, также исключает всякое применение статистики.

Следует обязательно упомянуть, что в случае эффекта Штарка для того, чтобы получить правильные соотношения интенсивностей компонент тонкой структуры, требовалось то же самое предположение относительно квадратов амплитуд собственных колебаний, относящихся к тому же самому собственному значению (см. Q III, с. 465).

§ 4. Произвольная система в термостате

Возвратимся к соображениям, приведенным в § 2. Предположим теперь, что с самого начала (и, следовательно, также постоянно) возбуждено лишь собственное значение (14). Кроме того, предположим теперь, что четыре рассматриваемых собственных значения подсистемы $E_k, E_{k'}, F_l, F_{l'}$, которые мы в § 2 молча считали однократными, имеют кратность $\alpha_k, \alpha_{k'}, \alpha_l, \alpha_{l'}$. Собственное значение (14) в таком случае будет $(\alpha_k \alpha_{l'} + \alpha_{k'} \alpha_l)$ -кратным, так как вместо вырожденных собственных функций (15) появляются две группы вида $\alpha_k \alpha_{l'}$ или $\alpha_{k'} \alpha_l$. Согласно статистической гипотезе (§ 3) сумма квадратов амплитуд первой группы относится к сумме квадратов амплитуд второй группы, как

$$\alpha_k \alpha_{l'} \quad \text{к} \quad \alpha_{k'} \alpha_l. \quad (17)$$

В соответствии с изложенным в § 2 это является также отношением суммы квадратов амплитуд всех собственных колебаний, принадлежащих к E_k ,

к сумме квадратов амплитуд всех собственных колебаний, относящихся к E_k , в первой системе, рассматриваемой изолированно.

Согласно нашей статистической гипотезе взаимодействие с чужой системой навязывает с самого начала неопределенному отношению сумм квадратов амплитуд, принадлежащих к различным собственным значениям, вполне определенное значение, которое определяется «крестообразными» произведениями степени вырождения (крестообразными — это значит, что собственный «высший» уровень соединяется с чужим нижним, и наоборот). Для краткости мы будем впредь называть сумму квадратов амплитуд, относящуюся к одному собственному значению, его интенсивностью возбуждения.

Перейдем теперь к несколько более сложному случаю. Будем считать, что в общей системе постоянно возбуждено только одно собственное значение, которое мы называем E . Но вторая система (φ_l, F_l), которую мы теперь будем называть термостатом, пусть будет чрезвычайно большой системой с исключительно плотным спектром собственных значений в том смысле, что для каждого E первой системы, которую мы будем называть термометром, всегда существует собственное значение термостата F_l , удовлетворяющее соотношению

$$F_l = E - E_k, \quad (18)$$

даже если при этом F_l чрезвычайно многократно.

Вследствие этого интенсивностям возбуждения всех собственных значений E_k термометра навязывается вполне определенное соотношение, именно они ведут себя как произведения

$$\alpha_k \alpha_l. \quad (19)$$

Однако соотношения для α_l можно определить весьма общим способом. Вопрос о кратности α_l собственного значения F_l термостата, т. е. числе существенно различных собственных функций термостата, относящихся к этому собственному значению, как раз совпадает, по-видимому, с вопросом о числе существенно различных способов распределения энергии F_l в термостате, если бы он был «квантованным по энергии». Это тот же вопрос, который поставила бы при вычислении энтропии термостата квантовая статистика Планка, согласно которой энтропия приравнивается k -кратному логарифму (k — постоянная Больцмана) упомянутого числа. Единственное различие* в том, что в данном случае этот вопрос связан с некоторыми гипотетическими моментами. Результат же вычисления, естественно, от формы выражения не зависит. Это значит, что

$$k! \lg \alpha_l = S(E - E_k),$$

* К нему, конечно, надо добавить хорошо известные небольшие различия в специальном определении «уровней энергии» в новой квантовой механике по сравнению со старой («получисленное» квантование и т. п.). Кроме того, следует заметить: то, что ныне любят называть видом статистики (Бозе—Эйнштейна, Ферми и др.), не конкретизируется. Это проявляется только в том, что для собственных функций признают запрет Паули или запрет Гейзенберга, или скорее в том, что при планковском исчислении некоторые распределения энергии считают или не считают существенно различными.

где правая часть обозначает энтропию, которой обладает термостат при энергии $E - E_k$ в соответствии с квантовой статистикой Планка. Согласно (19) интенсивности возбуждения собственных значений E_k термометра ведут себя, следовательно, как величины

$$\alpha_k e^{\frac{1}{k} S(E - E_k)} \quad (20)$$

(при этом буква k употребляется в разных значениях).

Поскольку термостат очень большой, то можно положить

$$S(E - E_k) = S(E) - \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_E \cdot E_k = S(E) - \frac{E_k}{T}, \quad (21)$$

где T — температура термостата, вычисленная по Планку для энергии E . Это значит, что вместо передаточных отношений (20) можно применять следующие:

$$\alpha_k e^{-\frac{E_k}{kT}}. \quad (22)$$

Вместе с тем мы получили важный результат: средние интенсивности возбуждения собственных значений системы в термостате, в соответствии со старой квантовой статистикой, ведут себя как относительные числа соответствующих членов канонического ансамбля, находящихся в отдельных квантовых состояниях. При этом кратности собственных значений рассматриваемой системы выступают в качестве «квантовых весов».

Мы можем еще освободиться от предположения, что первоначально в общей системе возбуждено одно-единственное собственное значение E . Это полностью соответствует тому, как в классической статистике, исходя из микроканонического ансамбля, доказывают, что небольшая подсистема распределена в фазе канонически. При желании всегда можно дополнительно установить каноническое распределение также для общей системы, причем результат для подсистемы остается неизменным. Совершенно то же самое, естественно, имеет место в нашем случае.

Представленный выражением (22) результат в принципе должен быть достаточным, чтобы полностью перенести в новую теорию все важнейшие выводы старой квантовой статистики, прежде всего статистики газов, твердых тел и пустого пространства (формула излучения Планка), которые могут быть основаны на формуле Планка, разумеется, с большими или меньшими изменениями, о которых говорилось в последнем примечании. Я хотел бы обратить особое внимание на то, что это возможно, даже не основываясь на квантовых постулатах.

При желании можно все сказанное в этой заметке понимать в соответствии с представлениями Борна *, в которых характеризуются эти постулаты, а квадраты амплитуд истолковываются не как одновременные интенсивности возбуждения в отдельно взятой системе, но лишь как вероятности

* *M. Born. Z. Phys., 1926, 37, 863; 38, 803, 40, 167.*

(относительные частоты повторения) дискретных квантовых состояний в виртуальной совокупности. Я попытался рассмотреть, можно ли таким способом обойти статистическую гипотезу § 3. По-видимому, это не представляется возможным. По Борну, изменение со временем «поля вероятности» неизбежно («причинно») управляется волновым уравнением, а вследствие этого изменение во времени «амплитуд вероятности» — уравнениями (9). Упомянутое в § 3 возражение, основанное на обратимости, касается теперь, следовательно, изменения во времени амплитуд вероятности. Насколько я понимаю, поэтому никогда нельзя достигнуть недвусмысленного (необратимого) течения событий без дополнительной гипотезы об относительной вероятности различных возможных распределений начальных значений амплитуд вероятности. Меня страшит это построение — не только из-за его сложности, но и потому, что от теории, которая постулирует абсолютную, первичную вероятность как закон природы, можно было бы потребовать, чтобы она такой ценой по меньшей мере освободила нас от старых «эргодических трудностей» и позволила бы понять недвусмысленное течение природного события без дальнейших дополнительных предположений.

Поступило 10 июня 1927 г.

РАБОТЫ РАЗНЫХ ЛЕТ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

ОБ ОДНОМ ЗАМЕЧАТЕЛЬНОМ СВОЙСТВЕ КВАНТОВЫХ ТРАЕКТОРИЙ ЭЛЕКТРОНА¹

В вейлевской «мировой геометрии»*, помимо известной квадратичной дифференциальной формы, которая определяет метрику в отдельных мировых точках, фигурирует еще некоторая линейная форма

$$\varphi_0 dx_0 + \varphi_1 dx_1 + \varphi_2 dx_2 + \varphi_3 dx_3 = \varphi_i dx_i,$$

которая устанавливает метрическую связность мировых точек между собой. Ее геометрический смысл заключается в том, что «числовая мера» («Maßzahl») некоторого «отрезка» («Strecke») l (квадрат абсолютной величины некоторого вектора) при «конгруэнтном перенесении» отрезка в какую-либо соседнюю точку не остается неизменной, но испытывает изменение согласно формуле

$$dl = -l\varphi_i dx_i. \quad (1)$$

Вейль обнаружил, что заданием обеих величин (метрика в отдельных мировых точках + метрическая связность) определяется некоторая аффинная связность мира (т. е. параллельный перенос вектора), если только потребовать, чтобы при параллельном переносе какого-либо вектора отрезок его переносился конгруэнтно. При конгруэнтном перенесении некоторого отрезка вдоль определенного конечного участка мировой линии, например при параллельном переносе вектора вдоль такого участка, мера отрезка умножается на множитель

$$e^{-\int \varphi_i dx_i}, \quad (2)$$

причем криволинейный интеграл берется, конечно, по соответствующему участку мировой линии и существенно зависит от пути интегрирования, если только

$$f_{ik} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_k} - \frac{\partial \varphi_k}{\partial x_i} \quad (3)$$

¹ S. Schrödinger. Z. Phys., 1922, 12, 13. Перевод В. П. Визгина.

* См., например: H. Weyl. Raum, Zeit, Materie, 4 Aufl. Berlin, Springer, 1921. Ниже цитируется так: Weyl, RZM [1].

не исчезает тождественно. С физической точки зрения компоненты упомянутой выше аффинной связности рассматриваются как компоненты гравитационного поля, а f_{ik} — как электромагнитное поле. Если дело обстоит так, что при определенном выборе координат x_0 — время (в секундах), а x_1, x_2, x_3 — пространственные декартовы координаты (в сантиметрах), то φ_i , с точностью до некоторого универсального постоянного коэффициента пропорциональности, — электромагнитные потенциалы в обычном смысле:

$$V, \quad -\frac{1}{c} \mathcal{A}_x, \quad -\frac{1}{c} \mathcal{A}_y, \quad -\frac{1}{c} \mathcal{A}_z. \quad (4)$$

Если мы запишем этот коэффициент как $\gamma^{-1}e$, где e — элементарный заряд в электростатических единицах CGS, и потенциалы (4) как

$$\varphi_0 = \gamma^{-1}eV, \quad \varphi_1 = -\gamma^{-1} \frac{e}{c} \mathcal{A}_x, \quad \varphi_2 = -\gamma^{-1} \frac{e}{c} \mathcal{A}_y, \quad \varphi_3 = -\gamma^{-1} \frac{e}{c} \mathcal{A}_z,$$

то для γ , поскольку φ_0 имеет размерность сек^{-1} , eV — размерность «энергии», получится размерность действия ($\text{г} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{сек}^{-1}$). «Масштабный множитель» («Streckenfaktor») (2) оказывается равным

$$e \int \left(v dt = \frac{1}{c} \mathcal{A}_x dx - \frac{1}{c} \mathcal{A}_y dy - \frac{1}{c} \mathcal{A}_z dz \right) \quad (5)$$

Названное в заглавии и показавшееся мне замечательным свойство квантовых траекторий состоит в том, что «истинные» квантовые условия, т. е. условия, которые приводят к определению энергии и тем самым ее спектра, заключаются в требовании целочисленности кратности показателя степени масштабного множителя (5) величине $\gamma^{-1}\hbar$ (которая, согласно упомянутому выше, является отвлеченным числом) для всех приближенных периодов системы [2].

Прежде всего я хочу проиллюстрировать сказанное на отдельных примерах, так как обычно следует прибавить еще несколько «если» и «но», если утверждение высказано в слишком простой форме, как это только что сделано. Только после этого я буду обсуждать возможный физический смысл сформулированного высказывания, в чем, впрочем, должен тут же признаться, я продвинулся не слишком далеко.

А. Невозмущенная кеплеровская орбита*. Релятивистским эффектом будем сначала пренебрегать, позднее (в пункте Е) он будет обсужден отдельно. Тогда единственное «истинное» квантовое условие**

* Как мне письменно сообщил г-н Вейль, наше утверждение для этого случая было два года тому назад известно уже г-ну Фоккеру и тоже привело его к возможности введения чисто мнимых значений φ_i [3] (см. ниже).

** Мы следуем всюду борзовскому пониманию, в особенности его теории мало возмущенных периодических систем, как она изложена во второй части еще не законченной серии статей, опубликованных в докладах Копенгагенской академии (Kopenhagener Akade-

$$J = 2\tau\bar{T} = nh \quad (6)$$

(τ — период, $\bar{T}$ — среднее по времени значение кинетической энергии).

Если, далее, V — потенциал положительного ядра в том месте, где находится электрон, то считается, что он на бесконечности исчезает. Тогда, как известно,

$$\bar{T} = \frac{1}{2} e\bar{V} \quad [4], \quad (6a)$$

и, таким образом, подставляя (6a) в (6), получаем

$$e\bar{V} = e \int_0^{\tau} V dt = nh. \quad (7)$$

Показатель степени масштабного множителя (5) будет, таким образом, равен $— nh/\gamma$ для одного периода. Единственное «если и но» в этом простейшем случае — нормировка аддитивных констант в V .

В. Зееман-эффект. С механической точки зрения он проявляется как ларморова прецессия с частотой (равной числу прецессионных оборотов в секунду)

$$\frac{1}{\vartheta} = \frac{eH}{4\pi mc}. \quad (8)$$

С квантовотеоретической точки зрения остается учесть сформулированное условие и обеспечить тем самым «целочисленность масштабного показателя» (как мы будем для краткости его называть) для первого квазипериода, во всяком случае, приближенно. Более точное рассуждение показывает, что (7) остается в силе с точностью до члена, квадратично зависящего от H , потому что теорема Лармора справедлива именно в этом приближении, и для вращающегося репера с механической и квантовотеоретической точки зрения имеют место те же самые соотношения, как и в случае А для неподвижного репера [6]. Если мы теперь проверим, имеет ли место целочисленность и для второго квазипериода ϑ , то мы сможем оставить в стороне V -член, так как он дает определенно некоторый целочисленный вклад (а именно столько nh , сколько простых оборотов содержит ларморовский цикл). Теперь второе квантовое условие, как известно, требует, чтобы момент площадей относительно оси магнитного поля был равен

$$2m \frac{f}{\tau} = \frac{n'h}{2\pi}, \quad (9)$$

f — проекция площади эллипса на экваториальную плоскость.

mieschriften, Naturw. und Mathem. 8 Reihe. 1918, 4, 1, 2). В дальнейшем цитируется как: *Bohr*, 1. с. [5].

Из (8) и (9) получается

$$Hf \cdot \frac{\vartheta}{\tau} \cdot \frac{e}{c} = n'h, \quad (10)$$

где Hf — поток напряженности через площадь эллипса, поэтому

$$Hf = \int_{(\tau)} (\text{rot } \mathcal{A})_n df = \int \mathcal{A}_x dx + \mathcal{A}_y dy + \mathcal{A}_z dz, \quad (11)$$

следовательно, согласно (10) для полного ларморовского цикла получается

$$\frac{e}{c} \int_{(b)} \mathcal{A}_x dx + \mathcal{A}_y dy + \mathcal{A}_z dz = n'h; \quad (12)$$

дополнительное квантовое условие требует, таким образом, «целочисленности» магнитного добавочного члена в «масштабном показателе», проинтегрированного по одному ларморовскому периоду.

С. Штарк-эффект*. С механической точки зрения может рассматриваться вековое изменение не только положения, но также и формы кеплеровского эллипса; однако это вековое изменение (в приближении, которое соответствует эксперименту) является чисто периодическим, т. е. кеплеровский эллипс после завершения одного векового цикла принимает снова ту же самую форму и то же самое положение в пространстве. Орбитальный цикл можно описать следующим образом. Для определения центра тяжести обычной кеплеровской орбиты, принимая во внимание время пребывания электрона в отдельных частях орбиты («электрический центр тяжести»), находят точку деления пополам половины отложенного от ядра фокусного расстояния. Этот «электрический центр тяжести» осуществляет теперь в плоскости, перпендикулярной направлению поля, просто гармонические, в общем эллиптические колебания. При этом согласно сказанному форма кеплеровского эллипса должна изменяться, и изменяется не его большая полуось, а только эксцентриситет, который, таким образом, однозначно определяется мгновенным положением электрического центра тяжести. Мгновенное положение плоскости орбиты определяется тем, что хотя полный момент импульса изменяется вместе с эксцентриситетом, его компонента в направлении поля остается неизменной.

Дополнительное квантовое условие состоит в том, что расстояние ядра до упомянутой плоскости, перпендикулярной направлению поля, в которой электрический центр тяжести совершает свои вековые гармонические колебания, может принимать только известные дискретные значения. Еще удобнее для нашей цели другая формулировка этого дополнительного квантового условия, которая еще непосредственнее следует из боровской теории возмущенных периодических систем. Дополнительная энергия, которая равна усредненной за один кеплеровский период потенциальной энергии электрона

* Bohr, 1. с., 4, S. 69.

во внешнем поле (среднее значение секулярно постоянно), — эта дополнительная энергия, я бы сказал, находится, согласно Бору, в точно таком же отношении к вековому периоду ϑ , как полная энергия простого гармонического осциллятора к его периоду, т. е. должно выполняться

$$\Delta E = n'h \frac{1}{\vartheta} \quad (13)$$

(ΔE — дополнительная энергия, n' — целое число). Если теперь V' — потенциал внешнего поля, который в этом рассуждении должен быть нормирован так, чтобы он исчезал в ядре, то легко видеть, что

$$\Delta E = -e\bar{V}' = -\frac{e}{\tau} \int_t^{t+\tau} V' dt. \quad (14)$$

Из (13) и (14) следует

$$\frac{e\vartheta}{\tau} \int_t^{t+\tau} V' dt = e \int_t^{t+\vartheta} V' dt = -n'h. \quad (15)$$

Вид выражения (15) доказывает, таким, образом, «целочисленность» электрического дополнительного члена в масштабном показателе для векового «штарк-периода» — вполне аналогично результату для ларморовского периода в случае эффекта Зеемана.

В случае эффекта Зеемана мы могли из-за особенно простого характера векового возмущения из целочисленности дополнительного члена тотчас же заключить о целочисленности масштабного показателя в целом. Здесь это было бы преждевременно, поскольку среднее значение потенциала ядра V по некоторому кеплеровскому эллипсу испытывает возмущения первого порядка, которые могут накопиться во время векового периода ϑ до некоторого конечного значения*. Для полной уверенности мы возьмем главное квантовое условие в явной форме. Пусть q_1, q_2, q_3 — прямоугольные координаты электрона, p_1, p_2, p_3 — импульсы, так что должно выполняться:

$$\int_t^{t+\vartheta} (p_1 \dot{q}_1 + p_2 \dot{q}_2 + p_3 \dot{q}_3) dt = nh, \quad (16)$$

* Правда, Бор показал — и это непосредственно следует из векового постоянства $\bar{V}'$, — что среднее значение полной энергетической функции невозмущенной задачи по некоторому эллипсу испытывает только возмущения второго порядка. Для нас, однако, здесь важно, что речь идет лишь о потенциальной энергии, о которой ничего подобного сказать нельзя, потому что возмущающее поле делает недействительным соотношение (6а) между средними значениями обеих энергий.

причем ϑ — теперь более определенно дает точный квазипериод, по истечении которого координаты и импульсы воспроизводятся с большим приближением. Вследствие этого должно иметь место

$$\int_t^{t+\vartheta} \frac{d}{dt} (\sum p_i q_i) dt = 0.$$

Поэтому вместо (16) можно также записать

$$\int_t^{t+\vartheta} (q_1 \dot{p}_1 + q_2 \dot{p}_2 + q_3 \dot{p}_3) dt = -nh; \quad (16')$$

или, когда $U = e(V + V')$ — потенциальная энергия, то из (16') следует с учетом уравнений движения:

$$\int_t^{t+\vartheta} \left(q_1 \frac{\partial U}{\partial q_1} + q_2 \frac{\partial U}{\partial q_2} + q_3 \frac{\partial U}{\partial q_3} \right) dt = nh. \quad (16'')$$

Но обе составляющие U — однородные функции от q_i , а именно V — однородная функция (-1) -й степени, V' — однородная функция 1-й степени. Поэтому из (16'') следует

$$\int_t^{t+\vartheta} e(V - V') dt = nh. \quad (16''')$$

С учетом (15), таким образом, получается

$$\int_t^{t+\vartheta} e(V + V') dt = (n - 2n') h, \quad (17)$$

и тем самым доказательство закончено. Одно необходимое дополнительное замечание к нашему утверждению в случае эффекта Штарка — уже упомянутая ранее нормировка потенциала внешнего поля должна быть такова, чтобы он исчезал в ядре.

Д. Комбинированный штарк- и зееман-эффект с параллельными осями*. Согласно боровской теории возмущенных периодических систем при наложении однородных электрического и магнитного полей, в случае если возмущения, порождаемые каждым из них, одного порядка, хорошо определенные квантовые орбиты получают вообще только тогда**, когда оси полей параллельны. Мы ограничимся поэтому только указанным случаем.

В механическом отношении обсуждаемое явление представляет собой просто цикл штарк-эффекта, рассмотренного в предыдущем разделе, отно-

* Bohr, l. c., S. 91.

** Bohr, l. c., S. 93.

сительного репера, принимающего участие в ларморовском вращении, причем следует заметить, что ларморовская частота зависит только от электронных постоянных и напряженности магнитного поля, но не от формы и положения орбиты, так что ларморовское вращение и здесь равномерно. Квантовые условия также, так сказать, комбинируются. Большая полуось кеплеровского эллипса допускает те же самые значения, как и при невозмущенном движении, а расстояние ядра до плоскости, в которой колеблется электрический центр тяжести, — те же самые значения, как в случае чистого штарк-эффекта; и магнитное поле требует, чтобы компонента момента импульса в направлении поля (который и в чистом эффекте Штарка постоянен, но не квантован) теперь, как и в случае чистого зееман-эффекта, была произведением некоторого целочисленного множителя на $\hbar/2\pi$.

Полное возмущение теперь, конечно, не является более чисто периодическим, но появляются два, в общем несоизмеримых вековых периода одного порядка: в координатной системе, принимающей участие в ларморовской прецессии, воспроизводятся форма и положение кеплеровского эллипса в соответствии с периодом штарк-эффекта ϑ_s , в то время как эллипс, который гармонически пробегает электрический центр тяжести, за один ларморовский период, скажем ϑ_l , поворачивается на 360° вокруг направления поля. Так как по отношению к вращающейся системе координат как механические, так и квантотеоретические соотношения в точности те же самые, как и в чистом штарк-эффекте относительно неподвижной системы, и так как, далее, электрическое поле ларморовским вращением переводится само в себя, то легко понять, что первые два квантовых условия ведут к соотношению

$$\int_t^{t+\vartheta_s} e(V + V') dt = nh. \quad (18)$$

Что касается магнитного квантового условия, то можно полагать, что как кеплеровский период, так и момент площадей относительно направления поля, а потому и проекции кеплеровского эллипса на экваториальную плоскость или поток напряженности магнитного поля через площадь кеплеровского эллипса секулярно постоянны. Поэтому из магнитного квантового условия точно так же, как в пункте В, следует, что

$$\frac{e}{c} \int_{(\vartheta_l)} \mathcal{Q}_x dx + \mathcal{Q}_y dy + \mathcal{Q}_z dz = n'h; \quad (19)$$

криволинейный интеграл берется по одному ларморовскому циклу. То, что кеплеровский эллипс по истечении этого цикла, таким образом, не восстанавливает свой форму и положение, не имеет существенного значения.

Каждая из формул (18) и (19) представляет собой только часть масштабного показателя, а именно (18) — электрическую, а (19) — магнитную. При этом они относятся к совершенно различным временным промежуткам ϑ_s и ϑ_l , ни один из которых не является квазипериодом движения. Последнее, возможно, и имеет место в общем только с известным приближением для до-

статочного большого числа псевдопериодов ϑ_s и ϑ_l , которые приближенно равны друг другу:

$$n_s \vartheta_s = n_l \vartheta_l = \vartheta.$$

Если мы выберем здесь n_s точно целочисленным, n_l , напротив, таким, чтобы выписанное выше соотношение выполнялось точно, умножим (18) на n_s , а (19) на n_l и вычтем второе из первого, то получим

$$e \int_{(s)} \left\{ (V + V') dt - \frac{1}{c} (\mathcal{U}_x dx + \mathcal{U}_y dy + \mathcal{U}_z dz) \right\} = (n_s n - n_l n') h. \quad (20)$$

Здесь слева (с точностью до множителя — γ^{-1}) стоит полный масштабный показатель для квазипериода ϑ ; справа — целочисленное кратное h , целочисленное примерно с тем же приближением, с которым ϑ может рассматриваться как квазипериод. Так как n' — обычное магнитное квантовое число, то, по меньшей мере для низколежащих квантовых орбит, это достаточно малое целое число; небольшое отклонение n_l от целого числа не может быть существенно увеличено умножением на n' . (Иначе обстоит дело с n ; n — очень большое число, порядка числа кепперовских оборотов во время одного штарк-периода; но это не отразится на целочисленности правой части, поскольку n_s — в точности целое число и должно быть выбрано так, чтобы воспроизводилась фаза по прохождении кепперовской орбиты.)

Прежде всего кажется неудовлетворительным, что для вывода (20) приходилось использовать только некоторую известную линейную комбинацию обоих «истинных» (т. е. необходимых для определения значений энергии) квантовых условий (18) и (19). Все-таки мне кажется, что (18) и (19) в отдельности необходимы, чтобы обеспечить (20) для каждого квазипериода. Так как если, например, $n_s = 7$, $n_l = 12$ дают некоторый квазипериод, то в общем не только $n_s = 70$, $n_l = 120$, но также, возможно, $n_s = 69$, $n_l = 118$ дают некоторый другой квазипериод, примерно в 10 раз больший первого. Правда, в приведенных рассуждениях нельзя также использовать слишком большие числа вековых периодов, чтобы не ввести в игру члены, неквадратично зависящие от напряженностей поля, причем тогда находит границы своей применимости не только справедливость используемых здесь приближенных вычислений, но также и действительная физическая определенность квантовых орбит.

Е. Релятивистское изменение массы. Этим эффектом мы до сих пор пренебрегали. Это имело место в случаях В, С, D, когда предполагалось, что возмущение внешним полем велико по сравнению с «возмущением» чисто периодической кепперовской орбиты, вызываемым релятивистским изменением массы. Если теперь мы учтем этот эффект, то окажется, что свободный от воздействия сил атом имеет два квазипериода: короткий кепперовский период τ и период ϑ вращения перигелия. Для τ «целочисленность масштабного показателя» обеспечивается, естественно, посредством того же самого квантового условия, как и в нерелятивистском случае. Спрашивается, имеет ли это место для ϑ ? Если определить ϑ как квазипериод, т. е. в том смысле, что

координаты и импульсы воспроизводятся только приближенно, то, прежде всего, будет справедливо

$$\int_t^{t+\vartheta} (p_r \dot{r} + p_\varphi \dot{\varphi}) dt = n'h \quad (21)$$

(r, φ — полярные координаты, p_r, p_φ — соответствующие релятивистские импульсы); формула (21) — некоторая целочисленная линейная комбинация обычных «радиального» и «азимутального» квантовых условий. Подынтегральное выражение инвариантно относительно точечных преобразований, следовательно, верно также и в прямоугольных координатах:

$$\int_t^{t+\vartheta} (p_x \dot{x} + p_y \dot{y}) dt = n'h. \quad (21')$$

Здесь можно записать, поскольку $(xp_x + yp_y)$ возвращается к своему исходному значению,

$$\int_t^{t+\vartheta} (x \dot{p}_x + y \dot{p}_y) dt = -n'h, \quad (21'')$$

$\dot{p}_x, \dot{p}_y$ в релятивистской механике также равны частным производным потенциальной энергии; она равна $-eV$ и является однородной функцией (-1) -й степени от x и y . Поэтому из (21'') следует

$$\oint eV dt = n'h. \quad (21''')$$

Таким образом, справедливость нашего утверждения для невозмущенной релятивистской задачи доказана.

Релятивистский эффект Зеемана*, как известно, очень прост; он описывается релятивистской розеткой, находящейся в ларморовском вращении. При этом имеются два вековых периода как в обсужденном в пункте D случае двух параллельных полей. Соответствующее рассмотрение настолько аналогично тому, которое было дано там, что приводить его здесь было бы излишне — результат его ясен и без вычислений и, естественно, опять подтверждает наше утверждение.

Релятивистский штарк-эффект, который в недавнее время был исследован в превосходной работе Крамерса**, еще не согласован мной с развиваемой здесь точкой зрения, однако едва ли можно сомневаться, что существуют вполне аналогичные соотношения, как в случае D, и при эффекте Зеемана.

* Впервые обсуждался А. Зоммерфельдом (Phys. Z., 1916, 17, 491) и П. Дебаем (ibid., S. 507).

** Z. Phys., 1920, 3, 199.

Случай D с учетом теории относительности, насколько я знаю, еще не изучен, хотя он (вследствие его вращательной симметрии) должен привести к хорошо определенным квантовым орбитам. Однако он едва ли представляет существенный интерес.

Обсуждение результатов. Мы имеем следующее положение дел. Если бы электрон на своей орбите был связан с некоторым «отрезком» («масштабом»), который оставался бы при движении неизменным, то при отсчете от некоторой произвольной точки орбиты мера этого отрезка казалась бы всегда кратной некоторой почти целочисленной степени экспоненты

$$\frac{h}{e\gamma} \quad (22)$$

всякий раз, когда электрон возвращается с весьма большим приближением в исходное положение и одновременно в начальное состояние движения.

Трудно поверить, что этот результат — лишь случайное математическое следствие квантовых условий и не имеет более глубокого физического смысла. Несколько приближенный характер закона ничего не меняет по существу; ведь мы знаем, что квантовые орбиты вообще определены не вполне отчетливо* — и основание здесь двоякое. Во-первых, из-за силы реакции излучения, которая существует, скорее всего не в форме, требуемой классической электродинамикой, но в кванвотеоретической форме, дающей, конечно, тот же самый порядок величины, в противном случае нельзя было бы вычислить правильно на основе принципа соответствия время затухания** [7]. Во-вторых, известная неопределенность квантовых орбит возникает также потому, что движение в большинстве случаев вообще только с известным приближением является условно периодическим. Например, в случае зееман-эффекта членами, квадратично зависящими от напряженностей поля, следует принципиально пренебрегать; также и штарк-эффект, когда учитывают релятивистские поправки, не относится более к точно решаемым задачам***.

Связан ли в действительности электрон в своем движении с некоторым «отрезком», вопрос более чем спорный. Пожалуй, весьма возможно, что он в своем движении постоянно «настроен» в вейлевском смысле**** [8]. Возможно, смысл нашего утверждения надо искать в том, что электрону нельзя сопоставить каждое мгновение одну и ту же «настройку», более того, что она должна находиться в известной зависимости от квазипериодических орбитальных циклов. Можно попытаться угадать, какое значение могла бы иметь универсальная постоянная γ . Нам хорошо знакомы две универсальные постоянные размерности действия, а именно h и e^2/c (я, со своей стороны, убежден, что они не являются взаимно независимыми). Если бы γ была приближенно равна

* Bohr, l. c., S. 50, 61, 66, 97.

** A. Sommerfeld, W. Heisenberg. Z. Phys., 1922, 10, 393.

*** H. A. Kramers. Z. Phys., 1920, 3, 201.

**** Weyl, RZM, S. 280.

e^2/c , то универсальный множитель (22) был бы очень большим числом* порядка e^{1000} . Другая возможность, $\gamma \simeq h$, подсказывает мысль о том, нельзя ли представить себе γ как чисто мнимую величину

$$\gamma = \frac{h}{2\pi\sqrt{-1}},$$

тогда универсальный множитель (22) был бы равен единице, и мера сопутствующего отрезка воспроизводилась бы после каждого квазипериода. Я не рискнул бы решать, может ли нечто подобное иметь смысл в рамках мировой геометрии Вейля.

Впрочем, естественно думать, что e , h , c — не единственные универсальные постоянные, которые мы знаем. Если взять (обычную) гравитационную постоянную k и какую-нибудь универсальную массу, например массу электрона, то

$$\frac{e^2}{km^2} = \text{безразмерная величина} \simeq 10^{40} **.$$

Поэтому

$$\frac{he^2}{km^2}$$

— «универсальный квант действия» порядка 10^{+13} эрг·сек. Этим мы только хотим напомнить, что на основе одних лишь соображений размерности вопрос не может быть окончательно решен.

Поступило 5 октября 1922 г.

* $2\pi e^2/hc$ — так называемая постоянная структуры, равная $7,29 \cdot 10^{-3}$.

** См. также: Weyl, RZM, S. 238.

К ЭЙНШТЕЙНОВСКОЙ ТЕОРИИ ГАЗА¹

§ 1. Основная идея

Существенным пунктом новой теории газа, недавно разработанной Эйнштейном*, общепринято считать совершенно новую статистику, так называемую «статистику Бозе»**, которая применяется к движению молекул газа. Принятие этой новой статистики как некоторой первичной сущности, не подлежащей дальнейшему объяснению, нельзя признать оправданным***. Более того, за ней, по-видимому, скрывается предположение об определенной взаимной зависимости или взаимодействии между молекулами газа, которое, однако, в этой форме только с трудом поддается анализу.

Можно надеяться на более глубокое понимание сущности новой теории, если удастся сохранить в силе старые статистические методы, подтвержденные опытом и хорошо обоснованные логически, а изменения в основаниях произвести лишь там, где это можно сделать без насилия над разумом (*sacrificium intellectus*). К этому приводит следующая простая мысль: эйнштейновская теория газа получается в результате применения к молекулам газа такой статистики, которая, будучи применена к «световым атомам», дает закон излучения Планка. Но этот закон можно получить также с помощью «естественной» статистики, если применить ее к так называемым «эфирным резонаторам», т. е. к степеням свободы излучения****. Световые атомы выступают тогда только как уровни энергии эфирных осцилляторов. Переход от естественной статистики к статистике Бозе всегда можно заменить перестановкой ролей понятий «многообразия состояний энергии» и «многообразия носителей этих состояний». Таким образом, следует просто представить себе газ наподобие излучения полости, которое, однако, еще не согласуется с радикальным представлением о световых квантах. Тогда естественная статистика — при использовании удобного планковского метода суммирования состояний — ведет к эйнштейновской теории газа. Это означает не что иное, как принятие всерьез волновой теории де Бройля***** — Эйнштейна*****

¹ E. Schrödinger. Phys. Z., 1926, 27, 95. Перевод В. П. Визгина.

* A. Einstein. Berl. Ber., 1924, 261; 1925, 3.

** Bose. Z. Phys., 1924, 26, 178.

*** Ср.: A. Lande. Z. Phys., 1925, 33, 571. Правда, с некоторыми выводами этой работы я не могу согласиться.

**** J. H. Jeans. Philos. Mag., 1905, 10, 91; P. Debye. Ann. Physik, 1910, 33, 1427. Ср. последний абзац «Теплового излучения» Планка. Далее: M. v. Laue. Ann. Physik (4), 1914, 44, 1197.

***** L. de Broglie. Theses, Paris (Edit. Masson et Cie.), 1924. См. также: Ann. phys. (10), 1925, 3, 22.

***** A. Einstein, loc. cit., 1925, § 8.

движущихся частиц, согласно которой эти частицы представляются в виде некоторых «пенных гребней» («Schaumkamm») на фоне образующих их волн излучения. Реализация этой идеи, как мне кажется, достаточно интересна для того, чтобы ее здесь обсудить.

§ 2. Газ как система осцилляторов. Определение свободной энергии

Мы исходим из известного представления, что каждой из n заключенных в некотором объеме V молекул одноатомного идеального газа можно приписать дискретный ряд определенных состояний, в которых энергия молекулы равна

$$\epsilon_1, \epsilon_2, \dots, \epsilon_s, \dots \quad (1)$$

В любой момент времени в одном и том же состоянии может находиться любое число молекул.

Но только ради облегчения понимания я исхожу из этого привычного представления. На самом деле я сопоставляю каждому состоянию, в котором согласно (1) может находиться отдельная молекула, некоторую степень свободы всей системы и утверждаю, что s -я степень свободы имеет энергию $n_s \epsilon_s$, если — при традиционном способе выражения — как раз n_s молекул находятся в состоянии ϵ_s ; s -я степень свободы ведет себя так же, как одномерный гармонический осциллятор, поэтому она может принимать следующие значения энергии:

$$0, \epsilon_s, 2\epsilon_s, \dots, n_s \epsilon_s. \quad (2)$$

Вся система, таким образом, может рассматриваться при вычислении как некоторая совокупность линейных осцилляторов, т. е. как твердое тело или, лучше сказать, как некоторый объем, заполненный излучением, потому что число осцилляторов бесконечно. «Спектр собственных колебаний» дается рядом (1). При этом мы можем пока оставить его вполне произвольным.

Рассмотрим теперь эту систему планковским методом суммирования состояний. Общий член суммы состояний равен

$$e^{-\frac{1}{kT} (n_1 \epsilon_1 + n_2 \epsilon_2 + \dots + n_s \epsilon_s + \dots)}. \quad (3)$$

Если бы теперь мы имели дело с твердым телом или с объемом излучения, то n_s не подлежали бы никакому ограничению и сумма всех членов (3) известным образом представлялась бы как произведение простых сумм, каждая из которых может быть легко вычислена по формуле суммы геометрической прогрессии:

$$\prod_s \sum_{n_s=0}^{\infty} e^{-\frac{n_s \epsilon_s}{kT}} = \prod_s \frac{1}{1 - e^{-\frac{\epsilon_s}{kT}}}. \quad (4)$$

Это произведение было бы конечно для твердого тела и бесконечно — для объема, заполненного излучением. Своеобразие нашей системы заключается в том, что n_s связаны условием

$$\sum n_s = n. \quad (5)$$

То, что это условие, столь тривиальное и самоочевидное в теории газа, является согласно эйнштейновской теории характерной особенностью газобразного тела — при этом имеется еще только небольшое различие в спектре (1), — представляется мне ценнейшим результатом данного исследования.

Таким образом, мы должны будем в сумме состояний оставить только такие члены (3), для которых выполняется условие (5). Иначе говоря, нам необходимо из разложения бесконечного произведения (4) выбрать такие члены, которые имеют одну и ту же степень однородности n для бесконечно большого числа переменных

$$x_s = e^{-\frac{\epsilon_s}{kT}}; \quad s = 0, 1, 2, 3, \dots \text{ до } \infty. \quad (6)$$

Эта задача решается на основе прекрасной теоремы о вычетах, относящейся к теории функций*. Запишем в правой части (4) вместо каждого x_s произведение zx_s , затем умножим всю правую часть на z^{-n-1} и найдем вычет образованной таким образом функции комплексного переменного в точке $z=0$. Этот вычет, очевидно, равен умноженной на $2\pi i$ искомой сумме состояний, которую обозначим буквой Z :

$$Z = \frac{1}{2\pi i} \oint_{z=0} dz z^{-n-1} \prod_{s=1}^{\infty} \frac{1}{1 - zx_s}. \quad (7)$$

Исследование сходимости Π было бы здесь излишним. В дальнейшем мы представляем себе ϵ_s как неотрицательные монотонно возрастающие числа, а именно как бесконечный монотонно возрастающий числовой ряд. Подынтегральное выражение тогда внутри круга $|z| < 1/x_1$, за исключением точки $z=0$, регулярно и имеет, помимо полюса $z=0$, еще ряд полюсов

$$z_s = \frac{1}{x_s} \geq \frac{1}{x_1}, \quad s = 1, 2, 3, \dots, \quad (8)$$

на положительной действительной полуоси, которые концентрируются в бесконечности, где находится существенно особая точка. Для оценки (7) можно применить так называемый метод седловой точки**. Подынтегральное выражение имеет на действительной оси между 0 и $1/x_1$ из-за большого значения n исключительно резкий минимум, скажем при $z=r$. Как раз

* Введением используемого здесь элегантного метода в статистику мы обязаны Дарвину и Фаулеру: *C. G. Darwin, R. H. Fowler. Philos. Mag., 1922, 44, 450* (см. также там же, p. 823 и 1923, 45, 1).

** *B. Riemann. Ges. Math. Werke und Wissenschaftlicher Nachlass, S. 424* (2. Aufl. Leipzig, Teubner, 1892); *P. Debye. Math. Ann., 1909, 67, 535*. См. также: *Darwin, Fowler, loc. cit., p. 562*.

это значение функции образует очень резкий максимум на окружности $|z|=r$, а именно потому, что производные некоторой аналитической функции не зависят от направления и второй дифференциал для чисто мнимого приращения принимает очень большое отрицательное значение, в то время как действительное приращение имеет очень большое положительное значение. Интегрирование переносится на названную окружность, и его достаточно, как можно показать *, ограничить ближайшей окрестностью $z=r$.

Для точки r минимума посредством логарифмического дифференцирования получим

$$-\frac{n+1}{r} + \sum_{s=1}^{\infty} \frac{x_s}{1-rx_s} = 0. \quad (9)$$

Затем положим на окружности $z=re^{i\varphi}$ и разложим логарифм подынтегрального выражения в ряд по степеням φ . С учетом (9) находим

$$\lg \left(z^{-n-1} \prod_{s=1}^{\infty} \frac{1}{1-zx_s} \right) = \lg \left(r^{-n-1} \prod_{s=1}^{\infty} \frac{1}{1-rx_s} \right) - \frac{1}{2} \varphi^2 r \sum \frac{x_s}{(1-rx_s)^2} + \dots \quad (10)$$

Если подставить это в (7), где следует еще записать $dz=id\varphi$, то можно с очень хорошим приближением, которое мы здесь не станем оценивать, пренебречь членами с φ^3 и произвести интегрирование от $\varphi=-\infty$ до $\varphi=+\infty$. Таким образом получим

$$Z = \left(2\pi r \sum_{s=1}^{\infty} \frac{x_s}{(1-rx_s)^2} \right)^{-1/2} r^{-n-1} \prod_{s=1}^{\infty} \frac{1}{1-rx_s}. \quad (11)$$

Для планковской Ψ -функции, т. е. для отрицательной свободной энергии, деленной на температуру, тогда можно найти ($\Psi=k \lg Z$):

$$\Psi = -k \left\{ \sum_{s=1}^{\infty} \lg(1-rx_s) + (n+1) \lg r + \frac{1}{2} \lg \left(2\pi r \sum_{s=1}^{\infty} \frac{x_s}{(1-rx_s)^2} \right) \right\}. \quad (12)$$

Вспомним теперь о выражении x_s посредством (6). Число r определяется с помощью формулы (9) или формулы

$$n+1 = r \sum_{s=1}^{\infty} \frac{x_s}{1-rx_s}. \quad (9')$$

Если сравнить результат, содержащийся в формулах (6), (12) и (9'), с соответствующим результатом Эйнштейна (Ann. Phys., 1924, S. 263, уравнения (8'), (9'), (6a), (13) и (14)), то нетрудно установить их полное совпадение с той лишь оговоркой, что последним членом в фигурных скобках нашего уравнения (12) следует пренебречь. Наша величина r совпадает

* См. предыдущее примечание.

с эйнштейновской e^{-A^*} . То, что у нас всюду фигурирует $n+1$ вместо n , конечно, не имеет никакого значения. В остальном наши формулы являются существенно более общими, «спектр частот» (1) или, выражаясь иначе, уровни энергии отдельной молекулы носят достаточно общий характер.

Что касается пренебрежения последним членом в (12), то оно в общем оправдывается тем, что Σ , входящая в него, хотя и больше соответствующей суммы в (9'), но не на порядок. Этот член имеет порядок $\lg(n+1)$ и по сравнению с предшествующими в общем достаточно мал. В конце статьи мы еще вернемся к этому вопросу.

§ 3. Определение спектра частот

Было бы непоследовательно ограничиться здесь эйнштейновским определением энергетических уровней молекулы (1) путем квантования фазового пространства молекулы, так как для нас (1) — это спектр частот объема газа V . Мы вычислим его, опираясь на дебройлевское представление**, что молекула, движущаяся со скоростью $v = \beta c$ и имеющая массу покоя m , — не что иное, как «сигнал», можно сказать, «пенный гребень» системы волн, частота которой ν близка к

$$\nu = \frac{mc^2}{h \sqrt{1 - \beta^2}} \quad (13)$$

и для фазовой скорости которой выполняется закон дисперсии. Посредством предшествующего уравнения он связывается с соотношением

$$u = \frac{c}{\beta} = \frac{c^2}{v} \quad (14)$$

(v при этом играет роль скорости сигнала, как легко проверить и как это показал де Бройль). Речь идет о том, чтобы сосчитать число собственных колебаний объема V для волнового процесса, который подчиняется этому закону дисперсии. Если мы обозначим число собственных колебаний с длинами волн между ∞ и λ буквой s , то, как известно***,

$$s = \frac{4\pi V}{3} \lambda^{-3}. \quad (15)$$

При этом мы должны рассматривать осциллирующее состояние (функцию пространства) как некоторый скаляр — только тогда получается осмысленный результат. С учетом

$$\lambda^{-1} = \frac{\nu}{u} = \frac{mc\beta}{h \sqrt{1 - \beta^2}} \quad (16)$$

* Наше r , таким образом, это эйнштейновский «параметр вырождения» λ . Только у нас выполняется пока не условие $r \leq 1$, но лишь условие $r \leq 1/x_1$. Наша величина rx_1 совпадает с эйнштейновской e^{-a^*} .

** См. примечание к § 1.

*** *L. Flamm. Phys. Z.*, 1918, 19, 122. Для точного обоснования формулы (15) при произвольной форме объема см.: *H. Weyl. Math. Ann.*, 1912, 71, 441.

(15) дает

$$s = \frac{4\pi V}{3} \frac{m^3 c^3 \beta^3}{h^3 (1 - \beta^2)^{3/2}}. \quad (17)$$

Отсюда легко получить для искомого кванта энергии s -го собственного колебания

$$\epsilon_s = h\nu_s = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} = mc^2 \sqrt{1 + \frac{J^2 s^{2/3}}{m^2 c^2}}, \quad (18)$$

$$(J = h \left(\frac{4\pi V}{3} \right)^{-1/3}),$$

где J — некоторый определенный квант импульса, зависящий только от величины объема и не зависящий от природы газа. Для рассматриваемого лишь в теории газа случая очень малых значений β удобнее и привычнее, хотя и менее последовательно, под ϵ_s понимать только кинетическую энергию. Тогда получается приближенно

$$\epsilon'_s = mc^2 \left(\frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} - 1 \right) = mc^2 \left(\sqrt{1 + \frac{J^2 s^{2/3}}{m^2 c^2}} - 1 \right) = \frac{J^2}{2m} s^{2/3} = (2m)^{-1} h^2 \left(\frac{4\pi V}{3} \right)^{-2/3} s^{2/3}, \quad (19)$$

что, конечно, в точности совпадает с эйнштейновским уравнением (8).

Если, наоборот, β очень близко к 1, то из (18) получается приближенно

$$h\nu_s = Jcs^{1/3},$$

или

$$s = \frac{4\pi V}{3} \frac{\nu_s^3}{c^3}, \quad (20)$$

т. е. с точностью до пресловутого «поляризационного множителя» 2 — известная формула для степеней свободы излучения полости.

Различие в показателях степени s ($s^{2/3}$ в (19); $s^{1/3}$ в (20)) есть второе характерное отличие излучения полости от газа. Возведение экспоненты в степень $2/3$ в области длинных волн — следствие дисперсии. Дисперсия фазовой скорости, весьма значительная согласно (13) и (14) для длинных волн, напротив, практически исчезает для коротких волн, когда β приближается к 1. Это положение дел прямо противоположно тому, которое мы имеем в случае так называемых упругих ветвей колебаний твердого тела, и, наоборот, имеет известное сходство с так называемыми оптическими ветвями колебаний * многоатомного твердого тела. В области длинных волн совпадение даже полнее вследствие того, что как здесь, так и там частота практически не зависит от длины волны, и, следовательно, фазовая скорость прямо пропорциональна длине волны. Имеет ли это совпадение более глубокое значение — вопрос, который еще предстоит исследовать.

* Ср., например, превосходный обзор Г. Хекманна (G. Hecmann) в «Ergebnisse der exakten Naturwissenschaften», 1925, 4, 118.

Мы должны еще четко указать на некоторое существенное различие между нашим результатом (19) и подходом Эйнштейна. У нас в (19) недопустимо значение $s=0$, в то время как Эйнштейн его допускает. Дело в том, что для состояния покоя молекулы $\beta=0$, согласно (16), длина волны бесконечно велика, в то же самое время наибольшая длина волны собственных колебаний имеет порядок $V^{1/3}$. Вообще (19) для малых s — только очень грубое приближение, так как в этом случае, как известно, выполняется соотношение (15). Спектральный закон для наинизших собственных частот, как известно, зависит еще от формы объема, в котором происходят колебания. Поэтому результаты, для получения которых существенно использование распределения (19) также и для малых s , следует принимать с большой осторожностью. В общем можно только сказать, что эти результаты согласно излагаемой здесь теории, должны существенно зависеть от формы газового объема.

Я убежден в том, что исключение состояния покоя не вызовет никаких трудностей в эйнштейновской теории газа; только утрачивает смысл процесс «конденсации», описанный Эйнштейном. Параметр вырождения, у нас r , у Эйнштейна $\lambda=e^{-4}$, может при этом превысить единицу вплоть до значения

$$\frac{1}{x_1} = e^{\frac{h^2}{2mkT} \left(\frac{4\pi V}{3}\right)^{-2/3}}. \quad (21)$$

Я мог бы, отвлекаясь на мгновение от подробностей, недвусмысленно подчеркнуть, что допущение состояния покоя несовместимо с основами теории (потому что, как было указано выше, ему соответствует бесконечно длинная фазовая волна).

К более серьезным раздумьям побуждает то обстоятельство, что спектр частот (18) или (19), так же как и закон дисперсии (13) и (14), включает массу молекулы и зависит, таким образом, не от свойства объема V самого по себе, а от качества (не количества!) его содержимого. Недостаточно представлять себе, что специфика молекулы (ее масса) решающим образом определяет частоту ν процесса, от которой тогда фазовая скорость u зависела бы универсальным образом. Это как раз не имеет места. Если обозначить $\nu_0 = mc^2/h$ частоту покоя молекулы, то из (13) и (14) следует явное выражение для закона дисперсии

$$u = \frac{c\nu}{\sqrt{\nu^2 - \nu_0^2}}. \quad (22)$$

Закон дисперсии, таким образом, зависит от частоты покоя, но она входит в его выражение наподобие резонансной частоты. То, что универсальное излучение должно фигурировать в качестве некоторых «сигналов», или, быть может, его корпускулярных сингулярностей, — обстоятельство, значительно более сложное, чем излучение волн в максвелловской теории. Дело не только в том, что оно вообще обнаруживает дисперсию, но особенно в том, что закон дисперсии фазовой скорости для некоторой группы волн зависит еще и от того, какого рода сингулярность возникает вследствие суперпози-

ции соответствующей группы волн. При этом, с одной стороны, можно вспомнить о поведении «волн конечной амплитуды», а с другой стороны, связать указанное положение дел с тем обстоятельством, что дебройлевские фазовые волны некоторой прямолинейно движущейся частицы могут рассматриваться как плоские волны. Это следует понимать в том смысле, что поверхности постоянной фазы этих волн — плоскости, а, очевидно, не в том, что состояние колебаний во всех точках некоторой такой плоскости в точности одно и то же.

§ 4. Вычисление средних значений и флуктуаций

Для этого особенно подходит метод, изложенный в § 2, как это уже вытекает из цитированных выше работ Дарвина и Фаулера. Экспоненциальный множитель (3) является мерой вероятности обнаружения системы «чисел заполнения» или, на нашем языке, квантовых чисел $n_1, n_2, \dots, n_s, \dots$; конечно, если только эта комбинация чисел удовлетворяет условию (5). Чтобы найти среднее значение некоторой функции $f(n_1, n_2, \dots, n_s, \dots)$, следует эту функцию умножить на экспоненциальный множитель (3) и с полученным произведением поступить точно так же, как это было сделано ранее при вычислении суммы состояний Z . Полученный результат, поделенный на Z , дает искомую функцию f . Особенно просто выглядит этот метод при вычислении среднего значения некоторого произведения n_s . Перемножение (3) с n_s при этом можно понимать как операцию дифференцирования $-kT \frac{\partial}{\partial \epsilon_s}$, или, учитывая введение переменных (6): $x_s \frac{\partial}{\partial x_s}$. Эта эквивалентность остается в силе при повторении операции любое число раз, как в случае одного и того же значения s , так и в случае различных s . Но указанная выше операция, очевидно, переставима с операцией интегрирования (7), т. е. получают, например,

$$\bar{n}_s = \frac{x_s}{Z} \frac{\partial Z}{\partial x_s} = \frac{\partial \lg Z}{\partial \lg x_s} = \frac{1}{k} \frac{\partial \Psi}{\partial \lg x_s} \quad (23)$$

и для некоторого произвольного произведения

$$\overline{n_s n_t n_u \dots} = \left(\frac{\partial}{\partial \lg x_s} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \lg x_t} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \lg x_u} \right) \dots \frac{\Psi}{k}. \quad (24)$$

Ψ , конечно, совпадает с функцией (12). Индексы $s, t, u, \dots$ могут быть выбраны произвольно, однако соглашение об этом выборе, очевидно, должно быть сделано до выполнения операции дифференцирования, так как ее результат зависит от указанного выбора.

Строгое проведение в (24) предписанных операций дифференцирования функции (12) представляется, правда, очень сложным именно по двум причинам. Во-первых, последний логарифм в (12), представляющий собой лишь незначительный поправочный член, дает вклад, точное выражение которого затруднительно; во-вторых, величина r сама согласно (9') — некоторая функция x_s , что следовало бы учитывать при дифференцировании по x_s .

Но также и это влияние в общем очень невелико — изменение отдельного полюса ($z=1/x_s$) приводит к незначительному изменению места седловой точки. Я думаю, что более подробное исследование этих соотношений пока не представляет достаточного интереса. Если, таким образом, учесть сказанное, то только первый член в (12) дает вклад в среднее значение, т. е. можно записать

$$\overline{n_s n_t n_u} \dots = - \left(\frac{\partial}{\partial \lg x_s} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \lg x_t} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \lg x_u} \right) \dots \sum_{s=1}^{\infty} \lg(1 - rx_s). \quad (25)$$

Так, получается, например,

$$\begin{aligned} \bar{n}_s &= \frac{rx_s}{1 - rx_s}; & \bar{n}_s^2 &= \frac{rx_s(1 + rx_s)}{(1 - rx_s)^2}; & \overline{n_s n_t} &= \frac{r^2 x_s x_t}{(1 - rx_s)(1 - rx_t)}, \\ \bar{n}_s^2 - (\bar{n}_s)^2 &= \frac{rx_s}{(1 - rx_s)^2} = \bar{n}_s(\bar{n}_s + 1), & \frac{\bar{n}_s^2 - (\bar{n}_s)^2}{(\bar{n}_s)^2} &= 1 + \frac{1}{\bar{n}_s}. \end{aligned}$$

Выражение для $\bar{n}_s$ совпадает с (11) с. 263 у Эйнштейна (цит. соч.). Выражение для относительного квадрата флуктуации есть частный случай (34а) цит. соч., с. 9, полученного совершенно иным способом (посредством вспомогательного рассмотрения с полупроницаемыми стенками). Специализация при этом заключается в том, что у нас здесь речь идет о флуктуации числа молекул в некоторой единственной «ячейке», так что вместо величины, обратной числу ячеек, у нас фигурирует единица.

Но и общее выражение для флуктуации полного числа молекул в большем или меньшем «агрегате ячеек» содержится в названных формулах, и даже с еще большей степенью общности, чем в указанном сочинении, так как мысленно сгруппированные ячейки вовсе не обязаны быть «соседними», а могут быть выбраны вполне произвольно. Если знак суммы отнести к такому агрегату ячеек, то для $\bar{n}_s^2$ и $\overline{n_s n_t}$ из приведенных выше формул легко получить

$$\left(\sum_s \overline{n_s} \right)^2 - \left(\sum_s \bar{n}_s^2 \right) = \sum_s \bar{n}_s (\bar{n}_s + 1).$$

Следовательно,

$$\frac{\left(\sum_s \overline{n_s} \right)^2 - \left(\sum_s \bar{n}_s^2 \right)}{\left(\sum_s \bar{n}_s \right)^2} = \frac{\sum_s (\bar{n}_s)^2}{\left(\sum_s \bar{n}_s \right)^2} + \frac{1}{\sum_s \bar{n}_s}. \quad (26)$$

Если ячейки достаточно близки, так что x_s и $\bar{n}_s$ внутри агрегата приближенно совпадают, то первая производная правой части равна обратному числу ячеек.

Мы используем результаты (25) еще для того, чтобы оценить порядок последнего члена в (12) — логарифма, которым ранее пренебрегали.

Результат, найденный для $\bar{n}_s^2 - (\bar{n}_s)^2$, показывает, что

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \lg \left(2\pi r \sum_{s=1}^{\infty} \frac{x_s}{(1 - r x_s)^2} \right) &= \frac{1}{2} \lg 2\pi + \frac{1}{2} \lg \left[\sum_{s=1}^{\infty} \bar{n}_s (\bar{n}_s + 1) \right] = \\ &= \frac{1}{2} \lg 2\pi + \frac{1}{2} \lg \left[n + \sum_{s=1}^{\infty} (\bar{n}_s)^2 \right] < \lg (n + 1) + \frac{1}{2} \lg 2\pi. \end{aligned} \quad (27)$$

Этим членом по сравнению с $(n+1) \lg r$, входящим в (12), можно пренебрегать до тех пор, пока параметр вырождения r не станет почти равным 1. Последнее имеет место лишь при весьма сильном вырождении. В этом случае потребуется более точная оценка, которая, возможно, покажет, что наш добавочный член уже не является больше незначительным. Впрочем, эта оценка в общем только предполагаемый вывод — более строгое доказательство не должно использовать результатов, полученных в условиях пренебрежения оцениваемым членом.

§ 5. О возможности представления молекул или световых квантов посредством интерференции плоских волн

Рассуждение де Бройля (цит. соч.), на первый взгляд, вызывает некоторую тревогу вследствие того, что фазовые волны частиц рассматриваются как плоские волны. Очевидно, суперпозиция некоторого большого числа плоских волн с общей волновой нормалью и близкими частотами позволяет образовать некий «сигнал», который почти целиком сосредоточен в тонком плоскопараллельном «сечении» пространства. Однако может возникнуть сомнение, возможно ли и как локализовать сигнал в малой области пространства в каждом из трех измерений.

Это можно достичь, согласно Дебаю * и Лауэ **, тем, что в некоторой исходной волновой функции допустить варьирование не только частоты, но также и волновой нормали в достаточно малой области, а именно в малом пространственном угле $d\omega$, и затем проинтегрировать континуум бесконечно малых волновых функций по этим областям частот и волновых нормалей.

Правда, согласно классическим волновым законам нельзя добиться того, чтобы сконструированная таким образом «модель светового кванта», которая, впрочем, всегда представляет собой набор различных длин волн, распространяющихся во всех направлениях, также и длительно существовала. Наоборот, она расплывается по мере продвижения «фокуса».

Если бы с помощью квантотеоретической модификации классических волновых законов удалось избежать этого последнего следствия, то открылся бы путь к освобождению от дилеммы световых квантов.

* P. Debye. Ann. Physik, 1909, 30, 755.

** M. v. Laue. Ibid., 1924, 44, 1202 (§ 2 уже цитированной выше работы).

§ 6. Выводы

Действительное значение эйнштейновской теории газа заключается в том, что газ можно понимать как систему собственных линейных колебаний, подобно объему излучения или твердому телу. Однако в то время как для объема излучения существует бесконечно много собственных колебаний, без какого-либо ограничения на квантовые числа, а для твердого тела большое, но конечное число, снова без ограничения на квантовые числа, — газ имеет хотя и бесконечно много собственных колебаний, но все-таки для некоторого определенного «материально замкнутого» газообразного тела сумма квантовых чисел постоянна, так как она — в привычном словоупотреблении — соответствует числу молекул.

Частотный спектр газообразного тела получают, согласно де Бройлю, посредством квантования стоячих фазовых волн, заполняющих объем V , точно так же как при использовании известного метода Джинса и Дебая. То, что при этом получается некоторый другой спектр частот (ν , пропорциональна $s^{2/3}$, а не $s^{1/3}$), объясняется дисперсией фазовых волн.

Как только экспериментальные факты для какого-либо конкретного класса объектов заставят нас применить статистику Бозе (которая, конечно, в случае газа еще никоим образом не установлена), мы должны будем, по моему, сделать вывод, что этот класс объектов представляет собой совокупность не индивидуумов, а возбужденных состояний энергии. Статистика Бозе при этом появляется только как промежуточная стадия и может быть заменена «естественной» статистикой, применяемой для другого класса объектов.

Поступило 15 декабря 1925 г.

ВОЛНОВАЯ ТЕОРИЯ МЕХАНИКИ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ¹

§ 1. Теория, изложенная на следующих страницах, основана на чрезвычайно интересных и глубоких исследованиях Л. де Бройля * о так называемых «фазовых волнах» и прилагается к движению материальных частиц, в частности, к движению электрона или протона. Общая точка зрения излагаемой теории, опубликованной в ряде немецких статей **, заключается в том, что материальные точки состоят из систем волн или даже тождественны с ними. Крайнее представление, быть может, и ошибочно. Во всяком случае оно не дает никакого ответа на вопрос о том, почему в природе осуществляются именно данного рода волны, которые должны соответствовать материальным частицам с определенной массой и определенным зарядом. Но, с другой стороны, противоположная точка зрения, которая оставляет без внимания волны, изученные Л. де Бройлем, и рассматривает только движение материальных частиц, привела к таким значительным затруднениям в теории механики атомов, — и это после столетнего развития и углубления механики, — что представляется не только не опасным, но даже желательным уделить хотя бы на время особое внимание предлагаемой точке зрения. Поступая так, мы должны, конечно, помнить, что полное согласование в изучении различных сторон физических явлений может быть достигнуто только при гармоничном слиянии этих двух крайних точек зрения.

Главные преимущества излагаемой теории следующие:

а) законы движения и квантовые условия выводятся одновременно из простого гамильтонова принципа;

б) несогласие, существовавшее до сих пор в теории квантов между частотой движения и частотой излучения, устраняется, так как последние частоты совпадают с разностями первых. Определенная локализация электрического заряда в пространстве и во времени может быть связана с системой волн, а последняя объясняет, на основании обычно электродинамики, частоту, интенсивность и поляризацию испускаемого света и делает излишними всякого рода принципы соответствия и отбора;

в) представляется возможным проследить с помощью новой теории все детали так называемых «переходов», которые были совершенно таинственными до последнего времени;

¹ E. Schrödinger. Phys. Rev., 1926, 28, 1049. Перевод Л. Я. Штрума.

* L. de Broglie. Ann. Phys., 1925, 3, 22.

** E. Schrödinger. Ann. Physik., 1926, 79, 361, 489, 734; 80, 437; 81, 109; Naturwissenschaften, 1926, 14, 664.

г) существует несколько пунктов расхождения между новой и старой теорией по вопросу об отдельных значениях энергии или уровней частот. В этих случаях новая теория находится в большем согласии с опытом.

Чтобы пояснить ход мыслей, я возьму в качестве примера механической системы материальную точку с массой m , движущуюся в консервативном силовом поле с потенциальной энергией $V(x, y, z)$. Все последующее рассуждение может быть обобщено для движения «фазовой точки», изображающей движение любой консервативной системы в «фазовом пространстве» (пространстве q , но не пространстве pq). Мы сделаем это обобщение в несколько иной форме в § 7. Воспользовавшись обычными обозначениями, напомним выражение для кинетической энергии T

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}. \quad (1)$$

Известная гамильтонова функция действия W

$$W = \int_{t_0}^i (T - V) dt, \quad (2)$$

рассматриваемая как функция верхнего предела интегрирования и конечных значений и координат x, y, z , удовлетворяет уравнению Гамильтона* с частными производными

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial z} \right)^2 \right] + V(x, y, z) = 0. \quad (3)$$

Для решения этого уравнения полагаем, как обычно,

$$W = -Et + S(x, y, z), \quad (4)$$

где E — постоянная интегрирования, т. е. полная энергия, а S — функция только координат x, y, z . Уравнение (3) можно написать в таком виде:

$$|\text{grad } W| = \sqrt{2m(E - V)}. \quad (5)$$

В этой форме оно приводит к очень простой геометрической интерпретации. Положим, что t постоянно. Всякая функция W , зависящая от пространственных координат, может быть описана геометрически, если задать систему поверхностей, на которых W постоянна, и определить для каждой из этих поверхностей постоянное значение W_0 , которое функция W принимает для точек этой поверхности. С другой стороны, мы можем легко построить решение уравнения (5), исходя из некоторой произвольной поверхности и произвольно выбранного значения W_0 , которое мы ей припишем. Выберем исходную поверхность и исходное значение и примем (также произвольно)

* См., например, *M. Plank. Einführung in die Theoretische Physik. 1. Einführung in die allgemeine Mechanik. Leipzig, 1921, ch. 2.*

одну сторону этой поверхности за положительную. Мы можем легко построить нормаль в каждой точке избранной поверхности. Длина нормали будет

$$dn = \frac{dW_0}{\sqrt{2m(E-V)}}.$$

Совокупность полученных таким образом точек образует поверхность, которой мы должны приписать значение $W_0 + dW_0$. Продолжая этот процесс, мы получим систему поверхностей и соответствующих им значений постоянных, т. е. распределение функции W в пространстве, пока при постоянном t .

Положим теперь, что время изменяется. Из уравнения (4) следует, что система поверхностей не изменяется, но что значения постоянных переходят вдоль нормалей от одной поверхности к другой с некоторой скоростью u :

$$u = \frac{|E|}{\sqrt{2m(E-V)}}. \quad (6)$$

Скорость u есть функция постоянной энергии E и, кроме того, функция координат, так как содержит $V(x, y, z)$.

Вместо того чтобы представлять себе поверхности закрепленными в пространстве, а значения постоянной — переходящими от одной поверхности к другой, мы можем представить себе, что определенное численное значение W связано с некоторой индивидуальной поверхностью, а сами поверхности непрерывно движутся таким образом, что каждая из них занимает в точности положение и форму следующей поверхности. Тогда величина u , заданная уравнением (6), определяет величину скорости передвижения какой-либо поверхности по нормали в одной из ее точек. Придерживаясь этой точки зрения, мы приходим к наглядному представлению, которое вполне совпадает с картиной распространения системы стационарных волн в оптически неоднородной (но изотропной) среде, причем W пропорциональна фазе, а u есть фазовая скорость (показатель преломления полагается пропорциональным $1/u$). Очевидно, рассмотренное построение нормалей dn эквивалентно принципу Гюйгенса. Ортогональные траектории системы поверхностей W образуют систему лучей нашей оптической картины. Они представляют собой возможные траектории материальных точек в механической задаче. Действительно, известно, что

$$p_x = mv_x = \frac{\partial W}{\partial x} \quad (7)$$

(аналогичные уравнения для y и z). Следует заметить, что фазовая скорость u не есть скорость материальной точки. Последняя скорость равна на основании (7) и (5)

$$v = \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2} = \sqrt{\frac{2(E-V)}{m}}. \quad (8)$$

Сравнивая (6) и (8), мы видим, что величины u и v изменяются обратно пропорционально друг другу.

Можно легко показать соответствие между известным механическим принципом Гамильтона и столь же известным оптическим принципом Ферма.

§ 2. Все сказанное выше несколько не ново. Все это было известно в свое время Гамильтону гораздо лучше, чем большинству физиков в настоящее время. Действительно, теория распространения света в неоднородной среде, которую Гамильтон развил за десять лет до механической теории, сделалась, благодаря открывшейся ему поразительной аналогии, исходным пунктом для его знаменитой теории аналитической механики. Несмотря на большую популярность ее, путь, который привел к ней, был почти забыт*.

Необходимо особенно отметить следующее обстоятельство: хотя в приведенном нами рассуждении фигурируют такие понятия, как «волновые поверхности», «принцип Гюйгенса», «принцип Ферма», однако вся проведенная аналогия относится скорее к геометрической оптике, чем к реальной физической или волновой оптике. Действительно, главное и основное механическое представление есть представление о пути траектории материальной частицы и соответствует представлению о лучах в оптической аналогии. Но представление о лучах вполне определено только в чисто абстрактной геометрической оптике. Оно теряет почти всякий смысл в реальной физической оптике, как только размеры луча или материальных препятствий на его пути становятся сравнимыми с длиной волны. Если даже это не имеет места, то определение лучей в геометрической оптике все же только приближительное. Оно совершенно не может быть приложено к тонкой структуре реальных оптических явлений — к явлениям дифракции. Если даже несколько обобщить геометрическую оптику, присоединив к ней принцип Гюйгенса (в простой форме, примененной выше), то все же нельзя будет понять даже простейшие явления дифракции, если не прибавить еще другие кажущиеся странными правила, определяющие обстоятельства, при которых огибающая поверхность Гюйгенса имеет физическое значение, либо же не имеет его. (Я имею в виду построение «зон Френеля».) Эти правила были бы совершенно непонятны для того, кто занимается только геометрической оптикой. Кроме того, можно заметить, что те понятия, которые являются основными в реальной физической оптике, т. е. сама волновая функция (W есть только фаза), уравнение распространения волны, длина волны и частота колебаний, вовсе не входят в установленную выше аналогию. Входит, правда, фазовая скорость u , но, как мы видели, она не очень тесно связана с механической скоростью v .

На первый взгляд не представляется интересным детально разработать гамильтонову аналогию в отношении реальной волновой оптики. Если придать понятию о длине волны определенное физическое значение, то понятие

* См.: *F. Klein. Jahrsb. Dtsch. Math. Ver.*, 1891, 1; *Z. Math. und Phys.*, 1901, 46; *Ges. Abh.*, II, 601, 603; *E. T. Whittaker. Anal. Dyn.*, Ch. II; *A. Sommerfeld, Atombau*, S. 803. Аналогия была снова обнаружена в области релятивистской механики Л. де Бройля.

о лучах теряет определенный физический смысл, по крайней мере в некоторых случаях, и поэтому аналогия кажется ослабленной или даже вовсе разрушенной в тех случаях, когда размеры механических траекторий или их радиусы кривизны становятся сравнимыми с длиной волны. Чтобы спасти аналогию, нужно, казалось бы, приписать длине волны чрезвычайно малую величину, настолько, чтобы она была мала по сравнению со всеми размерами, которые могут играть какую-либо роль в вопросах механики. Но тогда разработка волновых образов представилась бы излишней, так как геометрическая оптика и есть предельный случай волновой оптики для исчезающе малых длин волн *.

С этими рассуждениями сопоставим тот поразительный факт, который мы повседневно познаем с несомненностью: этот факт состоит в том, что обычная механика в действительности неприменима к механическим системам очень малых, а именно атомных размеров. Принимая во внимание это обстоятельство, которое накладывает печать на всю современную физическую мысль, не представляется ли интересным исследовать вопрос: быть может, неприменимость обычной механики к микромеханическим проблемам оказывается такого же рода, как и неприменимость геометрической оптики к явлениям дифракции и интерференции, и не окажется ли возможным преодолеть ее подобным же способом? Другими словами: нужно обобщить гамильтонову аналогию и на волновую оптику, причем длине волны должен быть приписан в каждом частном случае определенный размер. Эта величина имеет реальное значение для механической задачи, а именно: обычная механика с ее представлением о движущейся точке и ее линейной траектории (или, в более общем смысле, об «изображающей точке», движущейся в координатном пространстве) верна приблизительно лишь в том случае, если прилагается к траектории, которая велика (или радиусы кривизны которой велики) по сравнению с длиной волны. Если же этого нет, то нужно изучить явление распространения волны. В простом случае материальной точки, движущейся во внешнем силовом поле, волновое явление можно представить себе совершающимся в обычном трехмерном пространстве. В случае более общей механической системы это явление нужно сначала поместить в координатное пространство (пространство q , а не пространство qr), а затем некоторым образом проектировать в обычное пространство. В известной мере уравнения обычной механики окажутся не более пригодными для изучения этих микромеханических волновых явлений, чем правила геометрической оптики — для изучения явлений дифракции. При этом исследовании вполне естественно воспользоваться общеизвестными методами волновой теории, соответственным образом обобщенными. Представления, бегло очерченные нами, могут получить свое оправдание в том успехе, какой имели их приложения.

§ 3. Обратимся к системе поверхностей W , о которых шла речь в § 1. С ними мы свяжем представление о стационарных синусоидальных волнах,

* *A. Sommerfeld, J. Runge. Ann. Physik, 1911, 35, 290.*

фаза которых определена величиной W в уравнении (4). Волновая функция ψ имеет вид

$$\psi = A(x, y, z) \sin \frac{W}{K} = A(x, y, z) \sin \left[-\frac{Et}{K} + \frac{S(x, y, z)}{K} \right], \quad (9)$$

где функция A — «амплитуда». Необходимо ввести постоянную K , которая должна иметь физическую размерность действия (энергия $\times$ время), так как аргумент, стоящий под знаком синуса, должен быть отвлеченным числом. Так как частота волны (9) равна, очевидно,

$$\nu = \frac{E}{2\pi K}, \quad (10)$$

то появляется большой соблазн считать K универсальной постоянной, не зависящей от E и не зависящей от природы механической системы; если сделать такое допущение и положить, что K равно $h/2\pi$, то частота ν выразится так:

$$\nu = \frac{E}{h}, \quad (11)$$

где h — постоянная Планка. Так мы приходим простым путем к известной всеобщей зависимости между энергией и частотой.

В обычной механике определенное значение имеет не абсолютная величина энергии, а разности между величинами энергии. Однако, несмотря на это затруднение, нулевой уровень энергии может быть определен вполне удовлетворительным способом, если воспользоваться релятивистской механикой и представлением об эквивалентности массы и энергии *. Но здесь у нас нет необходимости останавливаться на этом вопросе. Хотя частота ν волн в (10) или (11) и зависит от нулевого уровня энергии, длина волны не зависит от него. Согласно тому, что было сказано выше, наибольший интерес для нас представляет именно длина волны. Сравнение этой величины с размерами пути или орбиты материальной частицы, вычисленными согласно обычной механике, покажет нам, имеет ли это вычисление физический смысл и являются ли методы обычной механики приблизительно применимыми к решению специальной проблемы. Длина волны равна согласно (11) и (6)

$$\lambda = \frac{u}{\nu} = \frac{h}{\sqrt{2m(E-V)}}. \quad (12)$$

Здесь $E-V$ — кинетическая энергия $\frac{1}{2}mv^2$, которая действительно не зависит от нулевого уровня полной энергии. Подставив ее величину, получим

$$\lambda = \frac{h}{mv}. \quad (13)$$

* *L. de Broglie. Ann. phys., 1925, 3, 22.*

Чтобы ответить на вопрос, можно ли прилагать обычную механику к электрону, движущемуся по кеплеровой орбите атомных размеров, положим, что a есть длина атомного масштаба, и сравним λ с величиной a :

$$\frac{\lambda}{a} = \frac{h}{mva}. \quad (14)$$

Знаменатель правой части имеет, несомненно, тот же порядок величины, что и момент количества движения электрона, а последний, как известно, одного порядка с постоянной Планка в случае кеплеровой орбиты атомных размеров. Таким образом, порядок отношения λ/a становится равным единице, и обычная механика оказывается приложимой к такой орбите не в большей мере, чем геометрическая оптика приложима к дифракции света от диска, диаметр которого равен длине волны. Если бы физик попытался разобрать последнее явление с помощью представления о лучах, с которыми он свыкся в макроскопической геометрической оптике, то он встретился бы с чрезвычайно серьезными трудностями и кажущимися противоречиями. «Лучи» (линии, определяющие направление потока энергии) не были бы уже прямыми и взаимодействовали бы между собой самым странным образом, в полном противоречии с основными законами геометрической оптики.

Подобным же образом представление о траекториях материальных точек представляется неприменимым к орбитам атомных размеров. Вполне удовлетворительным представляется то обстоятельство, что, приравнявая K (по существу) постоянной Планка (соотношение 11), мы получаем для пределов применимости обычной механики величину в точности того же порядка, какой нужно было бы допустить, чтобы с помощью нового представления преодолеть затруднения квантовой теории. Мы можем добавить, что на основании (13) для кеплеровой электронной орбиты, соответствующей большому квантовому числу, отношение длины волны к размерам орбиты имеет порядок величины, равный единице, разделенной на квантовое число.

Таким образом, обычная механика дает лучшее приближение к пределу при увеличении квантового числа (или размеров орбиты), как и следует ожидать для всякой рациональной теории.

Согласно основному соотношению $\nu = E/h$ (соотношение (11)), фазовая скорость u , определенная формулой (6), оказывается зависящей от частоты ν . Поэтому формула (6) определяет дисперсию. Это очень интересно освещает взаимоотношения между двумя скоростями: скоростью v движущейся частицы (формула (8)) и фазовой скоростью u (формула (6)); легко доказать, что v в точности равно так называемой групповой скорости, выводимой из формулы дисперсии (6). Воспользовавшись этим интересным результатом, можно получить понятие о том, каким образом обыкновенная механика может дать приблизительное описание волнового движения. Налагая друг на друга волны с частотами в малом интервале между ν и $\nu + d\nu$, можно построить «пакет волн», размеры которого сравнительно малы во всех направлениях, хотя могут быть довольно велики по сравнению с длиной волны. Можно доказать, что «центр тяжести», так сказать, такого пакета движется согласно законам распространения волн по такой же точно траектории,

по которой двигалась бы материальная точка согласно законам обычной механики. Эта эквивалентность сохраняется даже в том случае, если размеры орбиты и невелики по сравнению с длиной волн. Но в последнем случае она не имеет значения, так как пакет волн расплывается по всем направлениям далеко за пределами траектории. Напротив, если размеры орбиты сравнительно велики, то движение пакета волн в целом может дать достаточное понятие о том, что происходит в действительности, если нас не интересует его внутреннее строение. Как указано выше, это «движение в целом» управляется законами обычной механики.

§ 4. Мы не станем больше останавливаться на этом вопросе, а займемся более интересными приложениями теории к микромеханическим проблемам. Волновые явления должны быть в этом случае изучены подробно. Это можно сделать только при помощи «уравнения распространения волны». Каково же это уравнение? В случае единственной материальной частоты, движущейся в поле внешней силы, проще всего попытаться воспользоваться обычным волновым уравнением

$$\Delta\psi - \frac{\ddot{\psi}}{u^2} = 0 \quad (15)$$

и подставить вместо u величину, которая задана формулой (6) и зависит от пространственных координат (через потенциальную энергию V) и от частоты $E/\hbar$. Последняя зависимость ограничивает применение уравнения (15) такими функциями ψ , которые зависят от времени только через множитель $e^{\pm 2\pi i t \frac{E}{\hbar}}$. (Подобное ограничение всегда налагается на уравнение волны, если мы имеем дело с дисперсией.) Поэтому мы имеем

$$\ddot{\psi} = - \frac{4\pi^2 E^2 \psi}{h^2}.$$

Подставив это значение в (6) и в (15), получим:

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m (E - V) \psi}{h^2} = 0, \quad (16)$$

где ψ можно считать зависящей только от x, y, z . (Мы не изменяем обозначения функции, как, собственно, следовало бы.)

Как теперь поступить с уравнением (16)? На первый взгляд, оно кажется малоприспособленным для разрешения атомных проблем, например, для определения дискретных уровней энергии в атоме водорода. Так как это дифференциальное уравнение с частными производными, то оно имеет множество решений мощности континуума. Но недостаточность последних в атомных проблемах состоит вовсе не в том, что они дают слишком мало возможных орбит, а, наоборот — слишком много. Задача «квантовых условий» и состоит в том, чтобы отобрать дискретное число этих орбит в качестве «реальных» или «стационарных», следуя принятым до последнего времени взглядам. Волновое уравнение (16), которое не ограничивает, а неопределенно увеличивает число возможных орбит, как будто еще ухудшает положение.

К счастью, эти опасения излишни благодаря чрезвычайно интересной особенности уравнения (16) для атомных проблем. Если, например, принять

$$V = -\frac{e^2}{r}, \quad (17)$$

где e — заряд электрона, $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, то мы получим для упрощенного атома водорода или задачи об одном теле:

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi^2 m (E + e^2/r) \psi}{h^2} = 0. \quad (18)$$

Оказывается, что для большей части значений энергии, или постоянной частот E , это уравнение вовсе не имеет решений, которые были бы непрерывны, конечны и однозначны во всем пространстве. Для этих значений E каждое решение ψ , которое удовлетворяет двум условиям (непрерывности и однозначности), неограниченно возрастает как при приближении к бесконечности, так и при приближении к началу координат. Единственные значения E , для которых это не имеет места, т. е. для которых существуют решения непрерывные, конечные и однозначные во всем пространстве, суть следующие:

$$1) E > 0;$$

$$2) E = -\frac{2\pi^2 m e^4}{h^2 n^2} \quad (n = 1, 2, 3, 4, \dots). \quad (19)$$

Первая совокупность значений соответствует гиперболическим орбитам в обычной механике. Согласно общепринятому взгляду в обычной квантовой теории гиперболические орбиты не подвергаются квантованию. В нашем толковании это следует непосредственно из того обстоятельства, что все положительные значения E дают конечные решения. Вторая совокупность значений в точности соответствует по Бору стационарным уровням энергии эллиптических орбит.

Хотя я не могу здесь останавливаться на точном и довольно кропотливом доказательстве упомянутых утверждений, однако интересно описать в общих чертах решения, относящиеся ко второму ряду уровней E . Решение может быть выражено в трехмерных * полярных координатах, если положить ψ равной произведению функции полярных углов на функцию одного лишь радиуса r . Первая есть шаровая функция, порядок которой, увеличенный на единицу, соответствует азимутальному квантовому числу. Функции от r , входящие в решение, похожи (в общих чертах) на бесселевы функции, но отличаются тем, что имеют лишь конечное число положительных корней, причем это число в точности соответствует радиальному квантовому числу. Эти корни лежат внутри области в окрестности начала координат, размеры которой такого же порядка, как и соответствующая орбита Бора. При дальнейшем

* В данном случае нельзя, конечно, ограничить задачу двумя измерениями, как в обычной механике, так как волны по существу трехмерны.

увеличении r функция проходит через максимум или минимум, а затем убывает экспоненциально при неограниченном возрастании r .

Таким образом, все волновое явление, математически, правда, распространенное на все пространство, по существу ограничено маленьким шаром диаметром в несколько ангстрем, который может быть назван «атомом» согласно волновой механике. Некоторые из упомянутых решений (состоящие из произведения шаровой функции на функцию от r) напоминают основные колебания упругого шара с конечным числом «узловых поверхностей» в виде шаров, конусов и плоскостей. Но не следует, конечно, думать, что волновое движение, образующее атом, ограничено в общем случае одним из этих решений, частный отбор и отделение которых зависит в значительной степени от выбора координат. Каждому из дискретных значений E соответствует конечное число частных решений. Составив линейное выражение из последних и произвольных постоянных множителей, мы получим наиболее общее решение уравнения (18) для частного значения E . Число произвольных постоянных, входящих в это выражение, в точности равно так называемому «статистическому весу» этого уровня энергии, или, другими словами, числу отдельных уровней, на которые последний расщепляется, согласно теории Бора (а, значит, и согласно излагаемой теории) при появлении возмущающих сил, которые устраняют так называемое «вырождение» проблемы¹. При этом можно вспомнить, что в обычной механике упомянутый метод не дает вполне точного числа состояний. Полученные экспериментальные данные приводят к заключению, что приходится при помощи добавочного рассуждения, — более или менее убедительного с теоретической точки зрения, — исключить некоторые из этих состояний, а именно те, для которых экваториальное квантовое число равно нулю.

Мы можем с удовлетворением констатировать то обстоятельство, что согласно излагаемой теории упомянутое выше число произвольных постоянных, или, другими словами, число отдельных уровней или частот, на которые расщепляется каждый выродившийся уровень E при появлении возмущающего потенциала, определяется точно. Теория не нуждается ни в каких дополнениях, так как она исключает колебательное состояние, соответствующее боровской орбите с экваториальным квантовым числом, равным нулю.

Чтобы дополнить это описание, мы можем добавить, что самому низкому уровню E , или, с точки зрения волнового движения, «основному тону», соответствующему нормальному состоянию атома, присущ только один вид колебания, и притом очень простой; функция ϕ проявляет полную сфериче-

¹ Например, при движении электрона по эллиптической орбите уровень энергии зависит только от одного «главного» квантового числа, хотя форма орбиты определяется двумя квантовыми числами. Такая система называется «выродившейся». При появлении внешней возмущающей силы (например, электрического поля) каждый уровень энергии расщепляется на несколько уровней, зависящих уже от обоих квантовых чисел, и «вырождение» системы прекращается. — *Прим. перев.*

скую симметрию и совершенно не имеет узловых поверхностей. Как радиальное квантовое число, так и порядок шаровой функции обращаются в нуль.

§ 5. Рассмотрим вкратце вопрос о том, почему уравнение (18) имеет конечные решения только при определенных значениях постоянной E . Все соображения, изложенные на предыдущих страницах, были бы вполне обычны для всякого физика, если бы задача была так называемой «задачей о предельных условиях», т. е. если бы функция ψ требовалась только внутри какой-нибудь данной поверхности. — скажем, шара данного радиуса, — и должна была удовлетворять определенным условиям на границе этого шара, например обращаться в нуль. Но хотя это и не имеет места, однако задача на самом деле эквивалентна задаче о предельных условиях, причем граница есть шар бесконечного радиуса. Таким образом, величины (19) представляют собой в сущности то, что называется «характеристическими числами», а соответствующие им решения суть «фундаментальные функции» задачи, относящейся к уравнению (18). С математической точки зрения *, предельные условия в собственном смысле слова не нужны и неприменимы для бесконечной границы по той причине, что мы приближаемся к особой точке уравнения (18), если удаляемся по какому-нибудь направлению в пространстве в бесконечность. В этом легко убедиться, если разложить уравнение (18), представив в виде двух, как описано выше, воспользовавшись полярными координатами. Получающееся при этом обыкновенное дифференциальное уравнение с независимой переменной r имеет две особые точки, $r=0$ и $r=\infty$. Оно имеет (при отрицательных значениях E) только одно решение, которое остается конечным при $r=0$, и только одно решение, конечное при $r=\infty$. Хотя эти решения и не совпадают, но они имеют место при определенных значениях E , выраженных формулой (19).

Вместо того чтобы останавливаться на чисто математической стороне предмета, я попытаюсь дать понятие об особенных свойствах уравнения (18) так, чтобы суть дела была ясна и для тех, кто привык иметь дело только с общими принципами волновой теории. Если E отрицательно, то скобки в уравнении (18) будут отрицательными вне шара некоторого радиуса. Если вспомнить, каким путем уравнение (18) выведено из уравнения (15), то мы увидим, что при отрицательном значении скобок в (18) квадрат скорости волны будет отрицательным, а скорость волны — мнимой. Что же это означает? Как известно, оператор Лапласа непосредственно связан со средним избытком соседних значений функции по сравнению со значением функции в рассматриваемой точке. Поэтому обычное волновое уравнение (15) с положительной величиной u^2 указывает на ускоренное возрастание (или замедленное убывание) функции в тех точках, где значение ее меньше, чем средняя величина соседних значений, и, наоборот, замедленное возрастание (или ускоренное убывание) функции в тех точках, где значение ее больше, чем в соседних точках. Таким образом, обычное волновое уравнение ука-

* См., например, *R. Courant, D. Hilbert. Methoden der Mathematischen Physik. Bd. 1, V, 9, n 1.*

зывает на определенную тенденцию к сглаживанию всех различий между значениями функции в различных точках, хотя и не в самый момент появления этих различий и не как угодно, как это имеет место в случае уравнения теплопроводности. Тем не менее эта тенденция в известной мере предохраняет функцию от неограниченного возрастания или убывания.

Если же величина u^2 отрицательна, что, как мы видели, имеет иногда место для уравнения (18), то все предшествующие рассуждения нужно обратить. С течением времени появляется тенденция к беспредельному увеличению всех «скачков» функции и даже к самопроизвольному появлению скачков под влиянием самых незначительных причин. Понятно, что функция, которая определена уравнением с таким «революционным» характером, все время подвержена величайшей опасности неограниченного возрастания или убывания. Поэтому неудивительно, что необходимы специальные условия для того, чтобы предупредить такие случаи. Математическое исследование показывает, что эти условия состоят в том, чтобы E имело одно из значений, выражаемых вторым рядом величин (19), причем первый ряд значений устраняет, понятно, всякие случайности, так как квадрат фазовой скорости в этом случае положителен для всего пространства.

§ 6. Теперь сообщим некоторые результаты, полученные при помощи новой механики. Довольно простые проблемы представляют гармонический вибратор и ротатор. Уровни E для первого получаются равными

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu_0, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

вместо $nh\nu_0$, согласно обычной квантовой теории. Уровни E ротатора равны:

$$\frac{n(n+1)h^2}{8\pi^2 J}$$

(J — момент инерции), где известный множитель n^2 заменен через $n(n+1)$. Если нас интересуют только разности уровней, что и есть на самом деле, то это сводится к замене n^2 на

$$\left(n + \frac{1}{2}\right)^2,$$

так как

$$\left(n + \frac{1}{2}\right)^2 - n(n+1) = \frac{1}{4}$$

не зависит от n . Как известно, так называемые половинные квантовые числа подтверждаются опытными данными для большинства простых полосатых спектров и, по-видимому, никогда не оказываются в противоречии с опытом. Э. Фюс * подробно разработал теорию полосатых спектров двухатомных молекул, принимая во внимание взаимодействие вращения и колебания,

* E. Fues. Ann. Physik, 1926, 80, 367; вторая работа печатается.

а также то обстоятельство, что последнее не обладает простым гармоническим характером. Результат в точности соответствует обычной теории, за исключением того, что половинные квантовые числа получаются также во всех поправочных членах. Едва ли возможно было бы исследовать эту проблему, как и многие подобные ей, при помощи непосредственных методов, так как дифференциальное уравнение (16) вообще очень сложно. Но во многих случаях эту трудность удалось преодолеть при помощи теории возмущения, которая была разработана автором совместно с Э. Фюсом. Эта теория проявляет интересный параллелизм с известной теорией возмущений в обычной механике, но значительно проще последней. Она дает возможность вычислять только при помощи квадратур характеристических чисел и фундаментальных функций, вызываемых введением небольшого добавочного члена (функции независимых переменных) в коэффициенты уравнения, для которого известны характеристические числа и фундаментальные функции.

Интересный пример применения этой математической теории представляют возмущения, которые вызываются в атоме водорода внешним однородным электрическим полем (явление Штарка). Дискретные уровни Бальмера, указанные в формуле (19), уравнение 2, в качестве характеристических чисел, не простые, а многократные. Каждому из них соответствует n^2 характеристических чисел, которые совпадают случайно, или, точнее говоря, по причине высокой симметрии или простоты коэффициентов уравнения (18). Появление внешнего электрического поля, слабого по сравнению с полем атома, устраняет эту симметрию и расщепляет каждый из уровней Бальмера на ряд близких значений, число которых, правда, не достигает n^2 , так как расщепление в данном случае неполное. Автору удалось показать, что эти уровни в точности совпадают с теми, которые даны в известной формуле Эпштейна, что является довольно строгой проверкой нашей волновой механики, так как опыт указывает на отсутствие отклонений от этой замечательной формулы, во всяком случае для слабого поля.

Однако не только уровни, т. е. частоты, но также интенсивность и поляризация излучаемых линий в явлении Штарка могут быть вычислены при помощи волновой механики в очень близком согласии с опытом. До сих пор мы не затрагивали вопроса об определенном физическом значении волновой функции ψ . Однако можно ей приписать некоторое электродинамическое значение, о котором мы будем подробнее говорить в § 8. При этом атом представляется в виде системы флуктуирующих зарядов, распространенных непрерывно в пространстве и вызывающих результирующий электрический момент, который изменяется с течением времени, образуя совокупность частот, в точности совпадающих с разностями между частотами колебаний E/h , т. е. совпадающих с частотами испускаемого света. Уже это само по себе в высокой степени удовлетворительно. Но, кроме того, оказывается возможным вычислить амплитуды гармонических составляющих электрического момента для какого-либо направления в пространстве, например в случае явления Штарка параллельно электрическому полю или перпендикулярно полю. Если теория верна, то квадраты этих амплитуд должны быть пропорциональны интенсивностям отдельных компонент линий, поляризованных в ка-

ком-либо направлении. Были произведены довольно трудные вычисления, результат которых показан на рисунке *.

При сравнении теории с опытом необходимо иметь в виду, что вычисления были проведены только для предельного случая очень слабого внешнего поля и что при той силе поля, которая применялась на опыте (около 100 000 вольт/см), как опыт, так и теория указывают на заметное влияние интен-

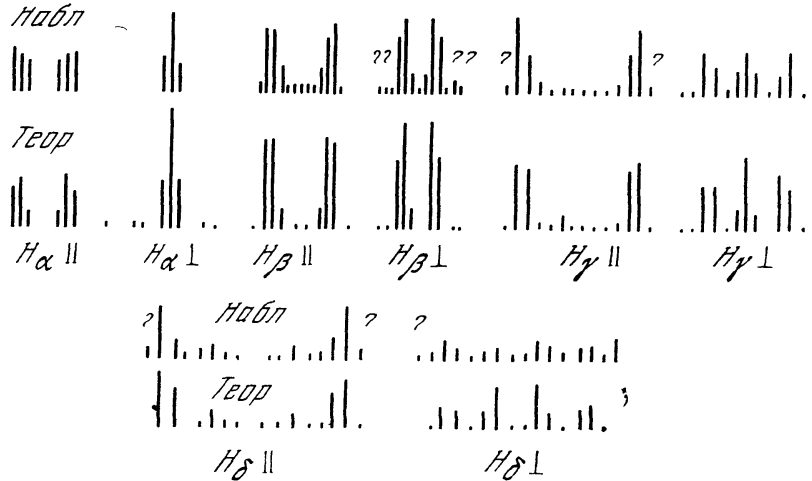


Рис. 1

сивности. В частности, очень слабые или исчезающе малые компоненты заметно усиливаются при возрастании поля. Сумма интенсивностей всех перпендикулярных компонент одной и той же балмеровской линии оказывается в точности равной сумме интенсивностей параллельных компонент той же линии. Это вполне совпадает с установленным Штарком положением, что поле не вызывает поляризации испускаемого света в целом.

Я должен указать, что пришел к упомянутому почти классическому вычислению интенсивностей, отметив а posteriori (т. е. после того, как были развиты основные черты волновой механики) его полное математическое согласие с теорией матриц, предложенной Гейзенбергом, Борном и Иорданом **. Результаты, указанные на рис. 1, можно назвать также результатами последней теории, хотя они еще не были вычислены при помощи непосредственного применения ее. Связь между двумя теориями довольно сложная и никак не может быть замечена с первого взгляда.

§ 7. В начале статьи мы указали на то, что в излагаемой теории как законы движения, так и квантовые условия могут быть выведены из одного

* Опытные данные взяты из работы Штарка (*J. Stark. Ann. Physik*, 1915, 48, 193). На рисунке отмечены точкой те теоретические интенсивности, которые слишком малы для того, чтобы быть выраженными при помощи черты заметной длины.

** *W. Heisenberg. Z. Phys.*, 1925, 33, 879; *M. Born, P. Jordan. Z. Phys.*, 1925, 34, 858; *M. Born, P. Jordan, W. Heisenberg. Z. Phys.*, 1926, 35, 557; *M. Born, N. Wiener. Z. Phys.*, 1926, 36, 174; *W. Heisenberg, P. Jordan. Z. Phys.*, 1926, 37, 263; *W. Pauli jr. Z. Phys.*, 1926, 36, 336; *P. A. M. Dirac. Proc. Roy. Soc.*, 1925, 109, 642; 1925, 110, 561; 1926, 111, 281, 405.

принципа Гамильтона. Чтобы доказать это, необходимо убедиться в том, что волновое уравнение (16) может быть выведено из вариационного принципа, так как это уравнение, действительно, единственное основное уравнение теории (для случая одной материальной точки, движущейся в консервативном силовом поле, — единственного подробно рассмотренного на предыдущих страницах).

Связь между уравнением (16) и принципом Гамильтона очень проста — такая же точно, как и в обыкновенных задачах о колебаниях. Кроме того, эта связь позволяет очень просто и последовательно обобщить теорию для любых консервативных систем.

Положим, что требуется найти экстремальные значения следующего интеграла, взятого по всему пространству:

$$J_1 = \iiint \left\{ \frac{h}{8\pi^2 m} \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \right)^2 \right] + V \psi^2 \right\} dx dy dz, \quad (20)$$

причем «допустимы» все функции ψ , которые однозначны, конечны, имеют непрерывные производные и сообщают следующему «нормализующему» интегралу постоянную величину, например 1:

$$J_2 = \iiint \psi^2 dx dy dz = 1. \quad (21)$$

Если выполнить вариацию при дополнительном условии по известным методам, то мы получим уравнение (16) в качестве известного необходимого условия для экстремального значения интеграла (20), причем постоянная E служит множителем Лагранжа, на который нужно умножить вариацию второго интеграла и прибавить к первому, чтобы принять в расчет дополнительное условие. Таким образом, нормализованные фундаментальные функции уравнения (16) суть так называемые экстремали интеграла (20) при нормализующем условии (21), причем характеристические числа, т. е. допустимые значения постоянной E , суть не что иное, как экстремальные значения интеграла (20). (Это свойство множителя Лагранжа хорошо известно. В нем легко убедиться, если принять во внимание, что экстремальное значение $J_1 - E J_2$ должно равняться нулю, так как всякое другое значение может быть увеличено или уменьшено простым умножением на постоянный множитель).

Подынтегральная функция (20) оказывается связанной очень простой зависимостью с обыкновенной гамильтоновой функцией вашей механической проблемы — в смысле обыкновенной механики. Упомянутая функция равна (см. § 1)

$$\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z). \quad (22)$$

Мы полагаем, что эта функция есть однородная квадратичная функция моментов p_x и т. д. и единицы и заменим

$$p_x, p_y, p_z, 1$$

соответственно через

$$\frac{\hbar}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad \frac{\hbar}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad \frac{\hbar}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial z}, \quad \psi.$$

Тогда мы получим подынтегральную функцию (20). Отсюда естественно обобщить нашу вариационную проблему и вместе с тем уравнение (16) на любую консервативную механическую систему. Гамильтонова функция такой системы имеет вид

$$\frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \sum_{k=1}^N a_{lk} p_l p_k + V, \quad (23)$$

где $a_{lk} = a_{kl}$, величины a_{lk} и V есть некоторые функции N обобщенных координат $q_1, \dots, q_N$. Полагаем, что (23) есть однородная квадратичная функция от $p_1, \dots, p_N$, 1 и заменим эти величины соответственно через

$$\frac{\hbar}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial q_1}, \dots, \frac{\hbar}{2\pi} \frac{\partial \psi}{\partial q_N}, \quad \psi.$$

Обозначив через Δ_p определитель

$$\Delta_p = \left| \sum \pm a_{lk} \right|,$$

составим интеграл

$$J_1 = \int \dots \int \left[\frac{\hbar^2}{8\pi^2} \sum_l \sum_k a_{lk} \left(\frac{\partial \psi}{\partial q_l} \right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) + V \psi^2 \right] \frac{1}{\sqrt{\Delta_p}} dq_1 \dots dq_N, \quad (24)$$

взятый по всему координатному пространству, и отыщем его экстремальные значения при дополнительном условии

$$J_2 = \int \dots \int \psi \frac{1}{\sqrt{\Delta_p}} dq_1 \dots dq_N = 1. \quad (25)$$

Это приводит к обобщению уравнения (16), а именно:

$$\sqrt{\Delta_p} \sum_l \frac{\partial}{\partial q_l} \left[\frac{\sum_k a_{lk} \frac{\partial \psi}{\partial q_k}}{\sqrt{\Delta_p}} \right] + \frac{8\pi^2}{\hbar^2} (E - V) \psi = 0, \quad (26)$$

где E , как и раньше, множитель Лагранжа для (25).

Двойная сумма, фигурирующая в (26), есть своего рода обобщение оператора Лапласа в неевклидовом координатном пространстве N измерений. Необходимость появления множителя

$$\frac{1}{\sqrt{\Delta_p}}$$

в интегралах типа (24) или (25) хорошо известна из статистической механики Гиббса;

$$\frac{1}{\sqrt{\Delta_p}} dq_1 \dots dq_N$$

есть просто неевклидов элемент объема, например, $r \sin \theta d\theta d\varphi dr$ в случае одной материальной точки с массой, равной единице, положение которой определяется тремя полярными координатами r, θ, φ .

(Если опустить определитель, то интегралы не будут инвариантными по отношению к точечным преобразованиям; они будут зависеть от выбора обобщенных координат.) Уравнение (26) применялось для решения всех проблем, упомянутых в § 6.

§ 8. Мы отложили обсуждение вопроса о реальном физическом значении волновой функции ψ (см. § 6) для того, чтобы можно было рассмотреть его наиболее общим образом для любой произвольной системы. Уравнение (16) или, в более общем случае, уравнение (26) выражает зависимость волновой функции ψ только от координат, а зависимость от времени выражается для каждого частного решения, соответствующего частному характеристическому числу $E = E_l$, вещественной частью величины

$$e^{(2\pi E_l t / h + \theta_l) i}, \quad i = \sqrt{-1},$$

где θ_l — фазовые постоянные. Если u_l ($l=1, 2, 3, \dots$) суть фундаментальные функции, то наиболее общее решение волновой проблемы равно (вещественной части)

$$\psi = \sum_{l=1}^{\infty} c_l u_l e^{(2\pi E_l t / h + \theta_l) i} \quad (27)$$

(Для простоты мы предполагаем, что характеристические числа все однократны и дискретны.) Величины c_l суть вещественные постоянные.

Составим теперь квадрат абсолютного значения комплексной функции ψ . Он равен

$$\psi \bar{\psi} = 2 \sum_{l, l'} c_l c_{l'} u_l u_{l'} \cos \left[\frac{2\pi (E_l - E_{l'})}{h} t + (\theta_l - \theta_{l'}) \right], \quad (28)$$

где чертой отмечена сопряженная комплексная величина. Величина $\psi \bar{\psi}$, подобно самой ψ , есть в общем случае функция обобщенных координат $q_1, \dots, q_N$ и времени, а не функции обычного пространства и времени, как в обычных волновых задачах. Отсюда возникает затруднение при исследовании физического значения волновой функции. В случае атома водорода (рассматриваемого как задача об одном теле) этого затруднения нет. В этом случае можно довольно точно вычислить значения интенсивностей, например компонент в явлении Штарка (см. § 6, рис. 1), при помощи следующей гипотезы: заряд электрона не сосредоточен в одной точке, а распределен по всему пространству с плотностью, пропорциональной величине $\psi \bar{\psi}$.

Необходимо иметь в виду, что и при этой гипотезе заряд электрона фактически ограничен областью в несколько ангстрем, так как волновая функ-

ция ϕ практически обращается в нуль при большем расстоянии от ядра (см. § 4). Флуктуация заряда определяется уравнением (28) в применении к частному случаю водородного атома. Чтобы найти излучение, которое, на основании обычной электродинамики, вызывается этими зарядами, нужно только вычислить прямоугольные составляющие полного электрического момента, умножив (28) соответственно на x , y , z и интегрируя по объему, например:

$$\begin{aligned} \iiint z\psi\bar{\phi}dxdydz = & \quad (29) \\ = 2 \sum_{l,l'} c_l c_{l'} \cos \left[\frac{2\pi (E_l - E_{l'}) t}{h} + (\theta_l - \theta_{l'}) \right] \iiint z u_l u_{l'} dxdydz. \end{aligned}$$

Таким образом, полный электрический момент рассматривается как результат наложения диполей, которые связаны с парами фундаментальных функций, колеблющихся гармонически с частотами

$$\frac{E_l - E_{l'}}{h},$$

хорошо известными из знаменитых условий частот Н. Бора.

Интенсивность испускаемого излучения данной частоты должна, по-видимому, быть пропорциональна квадрату величины

$$c_l c_{l'} \iiint z u_l u_{l'} dxdydz.$$

При вычислении интенсивностей компонент явления Штарка (рис. 1) делается допущение, что величины c_l равны для каждого ряда характеристических чисел, полученных из одного бальмеровского уровня (формула (19), уравнение 2) при действии электрического поля. Тогда относительные интенсивности компонент тонкой структуры должны быть пропорциональны квадрату тройного интеграла. Это допущение хорошо согласуется с опытом.

Тройной интеграл можно считать равным тому, что в теории Гейзенберга носит название «элемент матрицы $z(l, l')$ ». В этом заключается внутреннее соответствие между обеими теориями. Но важное преимущество излагаемой теории — как бы несовершенна она ни была во многих отношениях — состоит, по-моему, в том, что, исходя из определенной локализации заряда в пространстве и времени, мы действительно оказываемся в состоянии вычислить на основании обычной электродинамики как частоту, так и интенсивность и поляризацию испускаемого света. Все так называемые принципы отбора получаются автоматически из того обстоятельства, что тройной интеграл обращается в нуль в частных случаях.

Как же теперь обобщить эти представления для случая более одного, например N электронов? Здесь формальная теория Гейзенберга оказалась очень ценной. Она показала, не столько при помощи физического рассуждения, сколько благодаря своей компактной формальной структуре, что уравнение (29), представляющее прямоугольную составляющую полного электрического момента, должно быть сохранено, с теми лишь особенностями, что:

1) интегралы не тройные, а N -кратные, взятые по всему координатному пространству; 2) z заменяется $\sum l_i z_i$, т. е. составляющей z полного электрического момента, который вызывается моделью точечных зарядов в конфигурации $(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n)$, относящейся к элементу интегрирования $dx_1 \dots dz_N$.

На основании этого приходится сделать следующую гипотезу о физическом значении ψ — гипотезу, которая сводится, конечно, к нашей предыдущей в случае только одного электрона: реальное непрерывное распределение заряда есть своего рода среднее из непрерывного множества всевозможных конфигураций соответствующей модели точечных зарядов, причем среднее берется таким образом, что величина $\psi\bar{\psi}$ есть своего рода весовая функция в пространстве конфигурации.

В настоящее время еще нельзя выдвинуть какие-либо вполне определенные экспериментальные результаты в пользу обобщенной гипотезы. Но некоторые очень общие теоретические выводы о величине $\psi\bar{\psi}$ приводят меня к убеждению, что теория правильна. Например, величина интеграла от $\psi\bar{\psi}$, взятого по всему пространству, оказывается абсолютно постоянной (как и следует ожидать, если $\psi\bar{\psi}$ — правильная весовая функция) не только для консервативной, но и для неконсервативной системы. Исследование последней будет проведено в общих чертах в следующем параграфе.

§ 9. Уравнение (16) или, в более общем виде, уравнение (26), которое является основным для всего нашего рассуждения, было выведено в предположении, что ψ зависит от времени только через посредство множителя

$$e^{\pm \frac{2\pi i E t}{h}}. \quad (30)$$

Но отсюда следует, что

$$\dot{\psi} = \pm \frac{2\pi i E}{h} \psi. \quad (31)$$

Из этого уравнения и уравнения (26) можно исключить величину E , и тогда получится уравнение, которое действительно во всяком случае, какова бы ни была зависимость волновой функции ψ от времени:

$$\sqrt{\Delta_p} \sum_i \frac{\partial}{\partial q_i} \left(\frac{\sum_k a_{ik} \frac{\partial \psi}{\partial q_k}}{\sqrt{\Delta_p}} \right) - \frac{8\pi^2}{h^2} V\psi \mp \frac{4\pi i}{h} \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0. \quad (32)$$

Двойной знак в последнем члене не представляет затруднения. Так как физический смысл приписывается только произведению $\psi\bar{\psi}$, то мы можем принять для ψ любое из двух уравнений (32); тогда $\bar{\psi}$ будет удовлетворять другому уравнению, а произведение их останется неизменным.

Уравнение (32) может быть обобщено для произвольной неконсервативной системы, если только допустить, что потенциальная функция V зависит

от времени явным образом. Наибольший интерес представляет тот случай, когда к потенциальной энергии консервативной системы прибавляется 'небольшой член. Последний представляет неконсервативную потенциальную энергию, которая сообщается системе падающей на нее световой волной. Мы не можем здесь заняться деталями, но укажем только на основные черты решения. Действие падающего света состоит в том, что каждое свободное колебание невозмущенной системы частоты E_l/h сопровождается двумя вынужденными колебаниями с меньшими вообще амплитудами и с частотами $E_l/h \pm \nu$, где ν — частота падающего луча света. Следуя тем же принципам, что и в предыдущем параграфе, мы получим, что каждое свободное колебание, взаимодействуя с сопровождающими его вынужденными колебаниями, порождает вынужденное излучение света с разностной частотой

$$\frac{E_l}{h} - \left(\frac{E_l}{h} \pm \nu \right) = \mp \nu,$$

т. е. равной частоте падающего луча. Это вынужденное излучение нужно, конечно, отождествить со вторичными элементарными волнами, которые необходимы для описания поглощения, дисперсии и рассеяния. Действительно, вычисление показывает, что амплитуды этих волн возрастают очень заметно, когда частота падающего света приближается к одной из частот излучения $\frac{E_l - E_{l'}}{h}$. Окончательная формула почти совпадает с известной формулой дисперсии Гельмгольца в форме, сообщенной ей Крамерсом *.

Случай резонанса исследовать вполне удовлетворительно пока еще не удастся, так как член, выражающий затухание, в нашем основном уравнении отсутствует, даже в случае свободной консервативной системы. (Испускаемое излучение согласно допущению § 8 при взаимодействии каждой пары свободных колебаний должно, конечно, каким-то образом изменять их амплитуды. Но этого не получается из сделанных до сих пор допущений.) Однако интересно отметить, что даже при отсутствии члена с затуханием мы не встречаемся со случаем бесконечно большой амплитуды при резонансе, что, как известно, получается при классическом рассмотрении вопроса. Здесь получается только то, что падающая световая волна с произвольно малой амплитудой усиливает вынужденное колебание системы до конечной амплитуды. Кроме того, если вначале существует только одно свободное колебание, например, соответствующее энергии E_l , и если

$$h\nu = E_l - E_{l'},$$

то вынужденное колебание, усиленное до конечной амплитуды, тождественно по строению и частоте со свободным колебанием, соответствующим $E_{l'}$. В то же время амплитуда колебания E_l заметно уменьшается. Сумма квадратов всех амплитуд остается постоянной при всех обстоятельствах.

* H. A. Kramers. Nature, 1924, 10 May, 1924, 30 Aug.; H. A. J Kramers, W. Heisenberg. Z. Phys., 1925, 31, 681.

Такой ход явления проливает некоторый свет (хотя и неполный) на так называемый переход из одного стационарного состояния в другое, который до сих пор совершенно не поддавался расчету.

§ 10. В изложенном выше сообщении волновая теория механики была развита без рассмотрения двух очень важных вопросов: 1) изменения в классической механике, вносимые теорией относительности; 2) действие магнитного поля на атом. Но это можно считать уже частностями, так как Л. де Бройль, фундаментальные исследования которого послужили основой для излагаемой теории, исходил именно из релятивистской теории движения электрона и с самого начала принимал в расчет как магнитное, так и электрическое поле.

Конечно, можно взять ту же исходную точку зрения и для данной теории и развить ее достаточно далеко, применяя релятивистскую механику вместо классической и включая действие магнитного поля. Таким путем были получены интересные результаты относительно изменения длины волны, интенсивности и поляризации компонент тонкой структуры и компонент явления Зеемана для атома водорода¹. Я не счел необходимым развить здесь эту форму теории по двум причинам. Во-первых, пока еще не удалось обобщить релятивистскую теорию для системы с несколькими электронами. А именно в этой области можно рассчитывать на разрешение новой теорией проблем, которые были недоступны для старой теории. Во-вторых, релятивистская теория водородного атома является, по-видимому, неполной. Результаты оказываются в серьезном противоречии с опытом, так как в известной формуле Зоммерфельда для смещения компонент естественной тонкой структуры так называемое азимутальное квантовое число (а также и радиальное квантовое число) получается «полуцелым», т. е. равняется половине нечетного числа, а не целому числу. Таким образом, тонкая структура оказывается неправильной.

Это затруднение находится, по-видимому, в тесной связи с теорией Уленбека и Гаудсмита * о вращающемся электроны. Но каким образом можно принять в расчет вращение электрона в настоящей теории, пока еще неизвестно.

¹ V. Fock. Z. Phys., 1926, 38, 242. — Прим. перев.

* G. E. Uhlenbeck, S. Gaudsmit. Physica, 1925; Nature, 1926, 20 Feb.

ПРЕДСТАВЛЕНИЕ КВАНТОВЫХ ЗАКОНОВ С ПОМОЩЬЮ НЕПРЕРЫВНЫХ ФУНКЦИЙ¹

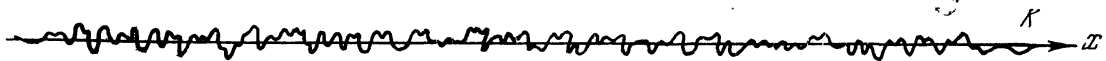
Пусть длинный цуг световых волн любой формы встречается с небольшой крупинкой K светочувствительного вещества и затем удаляется от нее. На рисунке представлена волна как функция x незадолго до момента прихода гребня волны к крупинке. (Та же самая кривая, рассматриваемая справа налево, в таком случае представляет также волновую функцию как функцию времени в точке K в процессе прохождения волны через эту точку.) С точки зрения классической физики следовало бы ожидать, что либо сама ордината волны, либо, возможно, ее приращение должны где-нибудь достигнуть некоторого порогового значения, чтобы вызвать разложение в крупинке, либо, может быть, даже, что действия определенным образом суммируются, примерно так, что интеграл по времени от квадрата функции в точке K должен был бы возрасти до определенного значения, прежде чем наступит разложение. Ничего этого не происходит, но все определяется только формой проходящего мимо цуга волн, а именно той ее особенностью, которая вовсе не так легко обнаруживается, а может быть лишь установлена с помощью громоздких вычислений. Вопрос сводится к тому, появляются ли при разложении волнового пакета на синусоидальные составляющие длины волн короче некоторой граничной длины λ_0 — так называемой длинноволновой границы фотохимического процесса, который должен наступить в крупинке. Если настолько короткие волны обнаруживаются, то разложение в крупинке происходит. Оно не имеет места в противном случае. Объясним это математически.

Мы берем представление Фурье волновой функции и проверяем, получают ли для $\lambda < \lambda_0$ отличные от нуля коэффициенты Фурье, или же оно обрывается раньше. Как известно, значение коэффициентов Фурье, относящихся к пространственному периоду λ , вычисляется как квадратный корень из суммы квадратов двух чисел, которые получают в отдельности, умножая рассматриваемую функцию один раз на $\cos \frac{2\pi x}{\lambda}$, а другой — на $\sin \frac{2\pi x}{\lambda}$ и интегрируя каждый раз по всему графику функции, следовательно, интегрируя в данном случае по всему волновому пакету. Поэтому химическое действие волнового пакета, если он таковым обладает, определяется тем, что некоторые интегралы, взятые по всему пакету волн, не обращаются в нуль. Возникает такое чувство, что речь идет при этом о форме волны в целом, а не о суммировании действия отдельных пространственных частей

¹ E. Schrödinger. Naturwissenschaften, 1929, 17, 486. Перевод А. М. Погали.

волны. Против последнего свидетельствуют: 1) осцилляторный характер упомянутых выше «пробных функций» $\cos \frac{2\pi x}{\lambda}$ и $\sin \frac{2\pi x}{\lambda}$; 2) то обстоятельство, что пропорциональное увеличение или уменьшение всех ординат волны является несущественным для вопроса, наступит ли разложение или нет (это обстоятельство тщательно проверено на эксперименте). Попутно отметим, что все экспериментальные методы, которые можно привлечь к анализу рассматриваемого волнового пакета (разложение с помощью призмы, решетки или другого интерференционного спектроскопа), дают именно значение коэффициентов Фурье, характеризующих распределение интенсивности в спектре.

Я изложил здесь несколько подробнее хорошо известное положение вещей, связанное со знаменитой работой Эйнштейна по применению квантовой



гипотезы Планка к фотоэлектрическим и фотохимическим явлениям. Это было сделано для разъяснения того способа, каким современная квантовая теория использует непрерывные пространственно-временные функции, а именно их качественные особенности, чтобы описать состояние и поведение системы, например атома или молекулы.

После того как Планк накануне этого столетия установил свой парадоксальный квантовый постулат, он и другие физики затратили немало усилий, чтобы в какой-либо форме согласовать его с прежними представлениями. Однако эти попытки не были успешными. Квантовая теория все более и более отдалялась даже от одного общего принципа классического естествознания, от того, что представление физического явления посредством мысленного образа не должно содержать пространственно-временных разрывов, т. е. что этот образ должен хотя бы принципиально предоставлять возможность получать сведения о том, что происходит в каждый момент в каждой точке пространства. Такого рода разрывы, т. е. нарушения этого принципа, обнаружились, например, в вопросе об электромагнитном поле в окрестности атома Резерфорда—Бора. Если бы электроны действительно были заряженными и движущимися материальными точками, то вокруг них должно было бы существовать поле, вращающееся вместе с ними. В противном случае понятия «заряженный» и «движущийся» имели бы другой смысл. Поэтому в ближайшей окрестности атома должны возникать переменные поля с тем же числом оборотов, как у электрона. Согласно основным положениям теории Максвелла эти переменные поля, имеющиеся в непосредственной близости от атома, обуславливали бы появление полей излучения той же самой частоты на больших расстояниях от атома. Однако вместо этого пришлось постулировать там существование полей излучения с совершенно иными свойствами: поле излучения при «квантовом переходе» характеризуется частотой, которая не имеет ничего общего с частотой обращения электрона, а при движении электронов на стационарных орбитах оно вообще отсутствует. Разрыв между

переменным полем вблизи атома и полем излучения на больших расстояниях не удалось устранить с помощью разумного мысленного образа даже и после того, как физики согласились пожертвовать теорией Максвелла.

Классический принцип пространственно-временного непрерывного описания оказался за рамками квантовой механики Гейзенберга—Борна. Эта теория использует понятие «координата» и частично даже «время» в совершенно новом смысле. Хотя она оперирует числами, которые называются, например, « x -координатой первого электрона» или « y -компонентой скорости второго электрона», они, однако, не являются числами в обычном смысле, а только в том обобщенном смысле, как у математика, который совокупность предметов называет «системой чисел», как только установлена договоренность относительно определенных комбинационных законов, позволяющих находить третий предмет по двум из них, подобно тому как числа 3 и 5 по одному хорошо известному закону дают 8, а по другому — 15. В общем невозможно обыкновенные числа делать более наглядными посредством отрезков и также нельзя «координаты» Гейзенберга вносить в декартову систему координат, чтобы сделать более наглядным положение материальной точки в определенное время или ее путь.

Так называемая волновая механика сделала возможным возвращение к классическому принципу пространственно-временного непрерывного описания событий. Она показала возможность описания квантовомеханической системы с помощью непрерывных функций координат и времени, т. е. функций, которые для каждой системы значений координат и времени имеют вполне определенные значения, подобно одной из хорошо известных величин, характеризующих поле в теории Максвелла, например электрическому потенциалу *. И те и другие описываются посредством старого классического аппарата дифференциальных уравнений с частными производными, и из функций волновой механики можно вычислить при помощи квадратур все те величины, которые определяют по теории Гейзенберга—Борна наблюдаемое поведение системы.

Но как раз только что упомянутые квадратуры, т. е. интегралы, которые в определенный момент времени должны браться по всей области координат, чтобы охватить наблюдаемое поведение системы, приводят к весьма своеобразным обстоятельствам, которые, строго говоря, запрещают «возврат к классике». Эти квадратуры не только математически, но и физически вполне аналогичны описанному вначале «определению коэффициентов Фурье» световой волны или, на языке эксперимента, ее спектрометрическому анализу. Обсудим это несколько подробнее.

Если идеальная классическая континуальная физика описывает явления в текущей жидкости, в звучащей воздушной колонке или в поле радиопередатчика с помощью непрерывных пространственно-временных функций (таких, как давление, плотность, скорость потока, напряженности электрического и

* Пусть будет позволено мне говорить здесь пока так, как будто бы имеется только «проблема одного тела».

магнитного полей и т. д.), то это означает, что численные значения названных величин в некотором определенном месте и в некоторое определенное время описывают состояние в указанной пространственно-временной точке. Это состояние можно было бы в принципе зарегистрировать (с точки зрения классической физики) с помощью достаточно малых, достаточно чувствительных и достаточно быстро реагирующих приборов, и их показания зависели бы только от локальных и мгновенных значений полевых величин; общий же вид этих функций в пространстве и времени (в рамках классической физики) определился бы только как суммарное обобщение отдельных показаний о событии в каждом отдельном месте пространства и в каждый отдельный момент времени.

Мы видели, что классическая физика в случае цуга световых волн ошибается, когда функции, которая его характеризует (т. е. функции, представленной на рис. 1), она приписывает лишь такой суммарный смысл. Химическая эффективность или неэффективность волнового пакета, как мы видели, определяется некоторыми качественными особенностями формы волнового пакета как целого. Эти факторы формы, как уже упоминалось, могут быть непосредственно найдены также на основе тщательного спектрометрического анализа волнового пакета.

К точно такому же заблуждению мы пришли бы, если, например, пожелали бы истолковать волномеханическую функцию, описывающую состояние водородного атома в заданный момент времени (назовем ее ψ -функцией), как суммарное обобщение отдельных показаний о состояниях в отдельных точках пространства. Скорее, характер функциональной зависимости ψ -функции в целом определяет наблюдаемое поведение атома водорода — в этом заключается ее значение. Как и в случае световой волны, этот характер должен «прощупываться» с помощью определенных пробных функций, в качестве которых мы имели бесконечное множество (так как λ принимает все возможные значения) функций $\cos \frac{2\pi x}{\lambda}$ и $\sin \frac{2\pi x}{\lambda}$; здесь же они образуют бесконечное множество так называемых собственных функций водородного атома. И так происходит во всех случаях. Собственные функции системы, которые устанавливаются раз и навсегда, служат в качестве пробных функций, используемых для того, чтобы «прощупать» имеющуюся в каждом случае ψ -функцию и определить те ее качественные особенности, которые являются определяющими для наблюдаемого поведения системы. «Прощупывание» всегда производят умножением фактически имеющейся функции поочередно на каждую собственную функцию и интегрированием каждый раз по всему координатному пространству*.

* В качестве уточнения можно добавить следующее. Функция ψ в целом не является функцией времени и точки, как мы первоначально указали, но она является функцией времени и одной, двух, трех и т. д. точек, если классическая модель системы состояла из одной, двух, трех и т. д. материальных точек. Это является примечательным и важным обстоятельством, которое, как следует, между прочим, отметить, приводит к трудностям в понимании ψ -функции как совокупности локальных состояний (если даже не делает

Подведем итоги. То, что для цуга световых волн есть прямое следствие гипотезы, установленной тридцать лет назад Планком, представляется сегодня характерной особенностью физического явления вообще. Эту особенность можно выразить с помощью непрерывных пространственно-временных функций, понимаемых, однако, не в смысле суммарного представления, как это было, например, в классической физике, но в том смысле, что они определяют наблюдаемое посредством качественных особенностей формы их графиков. Дополним теперь сказанное еще некоторыми замечаниями о математическом методе нового восприятия природы.

Математическим методом классической физики было дифференциальное исчисление, которое Ньютон создал специально для решения ее задач и которое с тех пор развивалось в тесном контакте с точным естествознанием. Очевидно, уже обычное дифференцирование способно характеризовать форму графика. Пусть произвольная функция $f(x)$ задана в виде кривой вдоль оси x , например, между $x=0$ и $x=\infty$. Возьмем производную $f'(x)$ и представим ее в виде кривой от $x=0$ до $x=\infty$. Эта кривая представляет собой наклон элементов графика во всех точках первоначальной кривой. Точно так же график второй производной представляет в целом общую картину кривизны элементов графика первоначальной кривой.

Общий * анализ Фурье, о котором говорилось выше, или преобразование Фурье, как мы теперь его предпочитаем называть, может рассматриваться как обобщение анализа формы кривой на основе дифференциального исчисления. При преобразовании Фурье из заданной кривой также выводится новая кривая, которая обобщает определенные элементы графика первоначальной кривой. Обобщение состоит в том, что теперь каждый отдельный элемент графика относится не к бесконечно близкой окрестности одной точки первоначальной кривой, но в целом к общему ходу первоначальной кривой. Следовательно, ординаты «преобразованной кривой» поставлены в соответствие не просто с ординатами первоначальной кривой, а скорее через посредство определенных пробных функций. Каждая ордината преобразованной кривой указывает, если так можно сказать, долю, которую вносит одна из пробных функций в общий вид первоначальной кривой.

его невозможным). Однако в рамках описанного выше общего анализа никаких затруднений не возникает, интегралы распространяются тогда просто на шесть, девять и т. д. пространственных координат вместо трех. Еще одно обстоятельство должно быть по меньшей мере упомянуто. Для упрощения изложения я поставил время в особое положение, хотя вполне понимаю ограниченность такого предположения. В самом деле, ψ как функцию времени можно также рассматривать с точки зрения ее целостной формы. Это видно, конечно, даже из простого примера введения, причем для светочувствительной крупинки речь идет о временном, а не о пространственном виде волны — они только случайно здесь совпадают.

* Т. е. представление одной функции совокупностью функций какой-нибудь так называемой полной ортогональной системы (которой всегда являются упомянутые выше собственные функции), но не только функциями синус и косинус. Метод преобразования Фурье можно также назвать методом аффинных преобразований в функциональном пространстве Гильберта.

Ввиду значительной свободы в выборе системы пробных функций преобразование Фурье охватывает огромное множество формообразующих возможностей. В качестве предельного случая оно включает в себе также обычное дифференцирование и притом не только однократное, но и n -кратное; так, первоначально заданная кривая может быть получена с помощью преобразования Фурье от нее самой. Разумеется, эта ситуация, как уже говорилось, является вырожденным граничным случаем, при котором приходится допускать в качестве пробных функций некоторые несобственные функции *. В связи с этим можно без затруднений дать рациональное толкование также производной нецелого порядка, так что можно говорить, например, о $3/4$ -й, $\sqrt{7}$ -й, π -й, $a + b\sqrt{-1}$ -й производной по x от функции $f(x)$. Уже вследствие этого метод Фурье оказывается широким обобщением процесса дифференцирования.

Таким образом, на почве старой дифференциальной математики вырос новый метод, который можно было бы охарактеризовать как «новую математику» и который лучше подходит к описанию природы. Его эффективность знают те, кто занимался проблемами классической полевой физики. Образы, с которыми он знакомит нас ** в этой области, как, например, формы собственных колебаний мембраны, поля антенны, жидкости, колеблющейся в сосуде и т. п., обусловлены только двумя причинами. Во-первых, они существенно определены краевыми условиями, имеющими, очевидно, случайный характер и зависящими чаще всего от намерений экспериментатора. В только что названных примерах это круглое, квадратное, прямоугольное и другое обрамление мембраны, вид антенны, форма сосуда, в котором колеблется жидкость и т. д. Во-вторых, в этих классических случаях, как указывалось уже выше, неразложенная еще функция поля, рассматриваемая как совокупность ее отдельных значений, является выражением того, что происходит и будет наблюдаться. Разложение же по собственным колебаниям является здесь только математическим приемом, способным лишь случайно приобрести повышенный физический или физиологический интерес, если в поле находятся другие колебательные устройства, поведение которых нас интересует, например, орган Корти или настроенный радиоприемник.

Напротив, в руках квантовой теории метод открывает нам новую точку зрения на образы, которые имеют здесь более непосредственное значение для понимания природы, так как в отношении только что названных двух пунктов имеет место прямо противоположная ситуация: во-первых, собственные функции атомов и молекул более не зависят от случайных или произвольных факторов, они определяются естественно. Во-вторых, судя по всему, разложение на эти естественно определенные функции в самом деле охватывает как раз существенные аспекты проблемы. Собственные функции являются действительно определяющими элементами формы для наблюдаемого события.

* Функции, введенные Дираком, которые он называет $\delta(x, y)$, $\delta'(x, y)$, $\delta''(x, y)$. . .

** W. Köhler. Die physischen Gestalten. Braunschweig, Fr. Vieweg 1920.

К ПРИНЦИПУ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ГЕЙЗЕНБЕРГА ¹

§ 1. Недавно Э. У. Кондон и Г. П. Робертсон * рассмотрели вопрос об обобщении фундаментального квантовомеханического принципа неопределенности на любую канонически несопряженную пару физических переменных. Занимаясь той же проблемой, я пришел к обобщению, которое идет несколько дальше, чем робертсоновское, и которое, собственно говоря, усиливает первоначальное неравенство Гейзенберга.

Позволим себе прежде всего изложить вкратце хорошо известные обстоятельства. Современное состояние «вопроса об интерпретации» таково. Объектом исследования является отдельная конкретная физическая система. Сумму всего знания, которым мы в каждом случае обладаем о состоянии системы, — перечень всего того, что мы можем о нем высказать, — представляет собой комплексная функция ψ в координатном пространстве системы (она закономерно изменяется со временем, однако это нас в настоящий момент не интересует). Математическим эквивалентом «физической переменной», т. е. определенного измерения, которое можно произвести над системой, является определенный линейный эрмитов оператор, преобразующий любую ψ -функцию в некоторую другую ψ -функцию. Зная оператор измерения, скажем A , и соответствующую функцию ψ , можно вычислить математическое ожидание соответствующего измерения:

$$\bar{A} = \int \psi^* A \psi dx \quad (1)$$

(ψ^* — комплексно-сопряженная функция; интегрирование распространяется на все координатное пространство, причем ψ предполагается всегда нормированной, т. е. $\int \psi^* \psi dx = 1$).

Математическое ожидание является средним значением при неограниченно частом повторении измерения. При этом необходимо, чтобы система всегда находилась в одном и том же состоянии, а не в состоянии, измененном самим измерением. Все возможные высказывания о системе сводятся, вообще говоря, к определению величины математического ожидания. Нужно к тому же, конечно, напомнить, что нам предоставляется возможность произвольного выбора численной шкалы нашего измерительного инструмента. Мы можем,

¹ *E. Schrödinger. Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss., 1930, 296. Перевод А. М. Погали.*

* *E. U. Condon. Science, 1929, Mai, 31; H. P. Robertson. Phys. Rev., 1929, 34, 163. А Зоммерфельд любезно обратил мое внимание на обе эти заметки, когда я ему рассказал о следующих ниже соображениях.*

например, приписать значение единицы только одному делению шкалы (или одному малому интервалу делений шкалы), а всем другим — нуль. Даже с таким «измерением» связан определенный оператор — его можно было бы назвать шорным оператором (Scheuklappenoperator); фон Нейман называет его единичным оператором. Относящееся к нему математическое ожидание является, очевидно, не чем иным, как вероятностью соответствующего значения измеряемой величины или интервала ее значений. Таким образом, функция ψ определяет всю статистику измерений.

Среднюю ошибку или среднюю неопределенность величины, соответствующей оператору A , определяют как

$$\Delta A = \sqrt{(A - \bar{A})^2} = \sqrt{A^2 - (\bar{A})^2}. \quad (2)$$

В первом из обоих выражений вместо $\bar{A}$ следовало бы взять $\bar{A}$, умноженное на оператор тождественного преобразования. Можно показать, что это определение не только формально заимствовано из теории ошибок, но и что ΔA действительно является средней ошибкой величины A , если статистика определена указанным выше способом.

Чтобы теперь для произведения неопределенностей двух произвольных величин A и B доказать неравенство, соответствующее гейзенберговскому, или, скорее, неравенство, даже несколько усиленное, нам необходимы следующие математические положения.

1. Эрмитовость оператора A обуславливает то, что математическое ожидание (1) является всегда действительным.

2. Для каждого эрмитова оператора имеем

$$\int f A g dx = \int g A^* f dx, \quad (3)$$

т. е. в интеграле такого рода этот оператор преобразовывается в комплексно-сопряженный, действуя при этом на другой множитель *.

3. Произведение двух эрмитовых операторов является в общем не эрмитовым, однако его можно представить как сумму «симметричного произведения» и половинного коммутатора:

$$AB = \frac{AB + BA}{2} + \frac{AB - BA}{2}. \quad (4)$$

Первое слагаемое является эрмитовым, а коммутатор — «косоэрмитовым», т. е. он становится эрмитовым после умножения на $i = \sqrt{-1}$. Представление (4) во многом соответствует разделению обыкновенного числа на действительную и мнимую части. Непосредственно из этого можно, в частности, предугадать разделение математического ожидания на действительную и мнимую части. «Математическое ожидание» каждого коммутатора является чисто мнимым.

* A^* определяется тем, что, очевидно, $A^* \psi^* = (A \psi)^*$, следовательно, $A^* \psi = (A \psi^*)^*$.

4. Наконец, нам необходимо так называемое неравенство Шварца *

$$(a_1 a_1^* + a_2 a_2^* + \dots + a_n a_n^*)(b_1 b_1^* + b_2 b_2^* + \dots + b_n b_n^*) \geq |a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_n b_n|^2, \quad (5)$$

которое мы применим в граничном случае к непрерывному набору значений двух функций f и g в координатном пространстве

$$\int f f^* dx \cdot \int g g^* dx \geq \left| \int f g dx \right|^2. \quad (5)$$

Положим

$$f = B\psi, \quad g = A^*\psi^*, \quad (6)$$

где A и B — какие-нибудь два эрмитовых оператора и ψ — любая волновая функция, т. е. любая непрерывная и нормированная функция в координатном пространстве.

Применяя (3), находим

$$\int \psi^* B^2 \psi dx \cdot \int \psi^* A^2 \psi dx \geq \left| \int \psi^* AB \psi dx \right|^2, \quad (7)$$

т. е. в соответствии с обозначениями (1)

$$\bar{A}^2 \cdot \bar{B}^2 \geq |\overline{AB}|^2. \quad (7')$$

Если разложить правую часть неравенства на сумму двух слагаемых в соответствии с (4), то получим

$$\bar{A}^2 \cdot \bar{B}^2 \geq \left(\frac{\overline{AB + BA}}{2} \right)^2 + \left| \frac{\overline{AB - BA}}{2} \right|^2. \quad (8)$$

Это уже представляет собой неравенство, которое мы собираемся доказать, но только для частного случая, когда $\bar{A}$ и $\bar{B}$ обращаются в нуль. Чтобы прийти к общему случаю, применим в неравенстве (8) вместо операторов A и B операторы

$$A - \alpha 1 \quad \text{и} \quad B - \beta 1.$$

При этом $\alpha 1$ является оператором умножения на α , а α и β должны быть произвольными действительными константами. Полученное таким образом неравенство справедливо для любой функции ψ , а также для каждой пары действительных постоянных α и β . Поэтому можно допустить для ψ -функции возможность влияния на выбор пары констант и специально положить

$$\alpha = \bar{A}, \quad \beta = \bar{B}.$$

* *H. Weyl. Gruppentheorie und Quantenmechanik. Leipzig, Hirzel, 1928, S. 272.* Настоящее доказательство в общем тесно примыкает к данному там доказательству неравенства Гейзенберга.

Таким образом, наконец, получим

$$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \left(\frac{AB + BA}{2} - \bar{A}\bar{B} \right)^2 + \left| \frac{AB - BA}{2} \right|^2. \quad (9)$$

Это окончательная форма. В ней новым является (насколько мне известно) первое из двух слагаемых справа. (Неравенство Г. П. Робертсона не содержит его.) Неравенство (9), следовательно, связывает три величины: 1) произведение средних квадратов отклонений; 2) квадрат абсолютного значения среднего значения половинного коммутатора; 3) величину, которая могла бы обозначать квадрат среднего произведения отклонений, при этом только должна быть принята во внимание некоммутативность, т. е. среднее произведение отклонений должно определяться как среднее арифметическое из

$$(\overline{A - \bar{A}})(\overline{B - \bar{B}}) \text{ и } (\overline{B - \bar{B}})(\overline{A - \bar{A}}), \quad (10)$$

которые представляют собой «смешанные» образования, полностью аналогичные $(\Delta A)^2$ и $(\Delta B)^2$.

К неравенству Гейзенберга можно прийти, огрубляя неравенство (9) вычеркиванием первого слагаемого правой части и выбирая A и B канонически сопряженными:

$$AB - BA = \frac{h}{2\pi i}.$$

Тогда получается:

$$\Delta A \cdot \Delta B \geq \frac{h}{4\pi}. \quad (11)$$

С другой стороны, известно, что предел Гейзенберга не слишком низок и реально достигается для некоторых специальных ψ -функций*. Из этого следует, что во всяком случае для этих специальных ψ -функций среднее произведение отклонений канонически сопряженных операторов обращается в нуль. Мы воспользуемся этим в § 2.

В классической теории ошибок или теории флуктуаций, как известно, обращение в нуль среднего произведения отклонений является необходимым (но не достаточным) критерием того, что две величины изменяются совершенно независимо друг от друга. Так как канонически сопряженные квантовые переменные, по-видимому, обладают некоторой «независимостью», выражающейся в том, что точное знание одной исключает всякое знание другой, пожалуй, можно было бы предположить, что их среднее произведение отклонений тождественно, т. е. при любой ψ -функции обращается в нуль. Однако этого никогда не происходит. Рассмотрим два канонически сопряженных оператора

$$A = x, \quad B = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x},$$

* J. v. Neumann. Z. Phys., 1929, 57, 34; W. Heisenberg. Ibid., 1927, 43, 187; C. G. Darwin. Proc. Roy. Soc., 1927, A117, 268.

тогда имеем *

$$\begin{aligned}\frac{2\pi i}{h} \frac{\overline{AB} + BA}{2} &= \frac{1}{2} \int \psi^* \left| x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) \right| dx = \\ &= \frac{1}{2} \int x \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx = \frac{1}{2} \int x \psi^* \psi \frac{\partial}{\partial x} \left(\lg \frac{\psi}{\psi^*} \right) dx, \\ \bar{A} &= \int x \psi^* \psi dx, \\ \frac{2\pi i}{h} B &= \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx = \frac{1}{2} \int \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) dx = \\ &= \frac{1}{2} \int \psi \psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left(\lg \frac{\psi}{\psi^*} \right) dx.\end{aligned}$$

Пусть имеем теперь функцию $\psi = re^{i\Phi}$ с действительным Φ и действительным неотрицательным r , которое удовлетворяет условию нормировки

$$\int r^2 dx = 1.$$

Тогда получим

$$\frac{2\pi}{h} \left(\frac{\overline{AB} + BA}{2} - \bar{A}B \right) = \int x r^2 \frac{\partial \Phi}{\partial x} dx - \int x r^2 dx \cdot \int r^2 \frac{\partial \Phi}{\partial x} dx.$$

Так как $\partial \Phi / \partial x$ — совершенно произвольная действительная функция и r^2 — совершенно произвольная (если не принимать во внимание условия нормировки) неотрицательная функция, то видно, что в общем правая часть не обращается в нуль. Необходимо лишь, например, выбрать r^2 четной, а $\partial \Phi / \partial x$ нечетной (и не обращающимися тождественно в нуль) функциями, и произведение отклонений будет непременно положительным.

Канонически сопряженная переменная, как известно, определяется неоднозначно. Если B сопряжено с A , тогда с ним сопряжено, например, также $B + \varepsilon A$ (ε любое действительное число). При этом изменяется также среднее произведение отклонений, а именно, как нетрудно подсчитать, на $\varepsilon (\Delta A)^2$. Точно так же можно было бы изменить его на $\varepsilon (\Delta B)^2$, заменяя A на $A + \varepsilon B$. Поэтому произведение отклонений можно всегда обратить в нуль путем изменения одного из обоих операторов, не разрушая их каноническую связь. Это можно получить, естественно, лишь при определенной специализации ψ -функции. Тождественное обращение в нуль произведения отклонений не может быть достигнуто.

§ 2. К обобщенному неравенству (9) нас случайно привела следующая постановка вопроса, которая сама по себе представляет определенный интерес. Пусть заданы свободная материальная точка с массой m , координатой q и импульсом p , соответствующая функции Гамильтона $H = p^2/2m$. Я должен

* Все интегралы берутся от $-\infty$ до $+\infty$.

произвести к моменту времени $t=0$ одновременное измерение координаты и импульса, причем как можно точнее, т. е. так, чтобы

$$\Delta q_0 \Delta p_0 = \frac{h}{4\pi}. \quad (12)$$

Кроме того, я должен неизбежную ошибку в измерении распределить между q_0 и p_0 так, чтобы для определенного более позднего момента t достигнуть по возможности наиболее точного предсказания места, т. е. чтобы Δq получилось как можно меньшим. Воспользуемся весьма удобным в этом случае «методом q -чисел», который находится в некотором контрасте с волновой механикой. Повторяя известное, я хотел бы это обстоятельство кратко разъяснить. Для теоретика, использующего волновую механику, оператор, отвечающий одной определенной физической величине, представляет собой нечто неизменное во времени. Если он хочет определить математическое ожидание этой величины для некоторого более позднего момента времени, он вычисляет на основе «зависящего от времени волнового уравнения» ψ -функцию для этого более позднего момента и применяет к ней соответствующий оператор, который, как уже сказано, является одинаковым для всех моментов времени. Напротив, теоретик, пользующийся «методом q -чисел», в некоторой степени имеет дело только с одной-единственной ψ -функцией для одного раз и навсегда фиксированного момента времени, впрочем, эту функцию он может не рассматривать, так как она полностью произвольна. Зато он считает операторы зависимыми от времени; он спрашивает: как изменится оператор со временем, т. е. какой оператор я должен применить к первоначальной ψ -функции, чтобы вычислить математическое ожидание соответствующей величины в момент t ?

И вот тогда оказывается, что с операторами (или q -числами, или матрицами) необходимо действовать почти как с обычными числами: их изменение со временем определяется *уравнениями движения классической механики*. Единственное различие состоит в том, что необходимо при случае соответствующим образом учитывать возможную некоммутативность умножения операторов.

Поэтому в данном простом случае интегрирование уравнения движения дает

$$q = q_0 + \frac{t}{m} p_0.$$

Из этого выражения можно тотчас образовать средний квадрат отклонения координаты $(\Delta q)^2$ для любого момента времени t

$$(\Delta q)^2 = \overline{\left(q_0 + \frac{t}{m} p_0\right)^2} - \left(\overline{q_0 + \frac{t}{m} p_0}\right)^2 = (\Delta q_0)^2 + \frac{2t}{m} \left(\overline{\frac{q_0 p_0 + p_0 q_0}{2}} - \bar{q}_0 \bar{p}_0\right) + \frac{t^2}{m^2} (\Delta p_0)^2.$$

В среднем члене появляется теперь как раз среднее произведение отклонений q_0 и p_0 , которое обращается в нуль, когда в соответствии с предположе-

нием q_0 и p_0 определены с оптимальной точностью. Поэтому получаем более простое соотношение

$$(\Delta q)^2 = (\Delta q_0)^2 + \frac{t^2}{m^2} (\Delta p_0)^2,$$

или вследствие (12)

$$(\Delta q)^2 = (\Delta q_0)^2 + \left(\frac{h}{4\pi}\right)^2 \frac{t^2}{m^2} \frac{1}{(\Delta q_0)^2} *.$$

Это выражение будет минимумом для того значения $(\Delta q_0)^2$, при котором оба слагаемых в правой части будут равными друг другу, т. е. для

$$(\Delta q_0)^2 = \frac{ht}{4\pi m},$$

тогда $(\Delta q)^2$ как раз вдвое больше $(\Delta q_0)^2$, т. е.

$$\Delta q = \sqrt{\frac{ht}{2\pi m}}. \quad (13)$$

Мне кажется, что в этом конечном результате представляют интерес два обстоятельства. Во-первых, пропорциональность квадратному корню из времени, которая напоминает хорошо известные классические законы флуктуаций. Во-вторых, то обстоятельство, что выражение (13) имеет достойный внимания абсолютный характер, поскольку точность, достижимая для более позднего момента, зависит только от промежутка времени, но зато вовсе не зависит от величины начального импульса. Например, в благоприятном случае для свободного электрона посредством предпринятого сейчас измерения положения и импульса можно предсказать его местонахождение на конец первой секунды с точностью около 1 см, причем совершенно независимо, движется ли электрон быстро или медленно **.

Разумеется, при очень больших скоростях это будет выглядеть иначе, так как необходимо принять во внимание теорию относительности. Я полагаю, что это может случиться по следующим простым соображениям. Применим уравнение (13) в системе покоя материальной точки. Пусть m_r — масса покоя, t_r — собственное время, тогда

$$(\Delta q)_r = \sqrt{\frac{ht_r}{2\pi m_r}}. \quad (14)$$

Следовательно, с этой точностью наблюдатель, движущийся вместе с системой, может предсказать местоположение материальной точки в движу-

* Это уравнение уже было выведено Гейзенбергом в его первой работе о принципе неопределенности (Z. Phys., 1927, 43, 188), однако на основе специальных математических соотношений для ψ -функции, имеющих, по-видимому, произвольный характер.

** Разумеется, существуют также волновые функции, которые определяют местоположение с любой заданной точностью в точно определенный более поздний момент времени. Требуется только непременно с помощью волнового уравнения исследовать на соответствующем интервале времени ход такой приближенной «вершинной функции» («Spitzenfunktion») в обратном направлении и принять, что полученная таким образом функция описывает начальное состояние. Она как раз и была бы «оптимальной» функцией.

щейся системе для момента времени, который он (движущийся наблюдатель) называет « t_r секундами позже». Когда он сообщает эти свои сведения посредством меток в пространстве, то для «покоящегося наблюдателя» они кажутся расположенными в отношении $\sqrt{1-\beta^2}:1$ ближе друг к другу.

Кроме того, со своей точки зрения, «покоящийся наблюдатель» должен отметить, что предсказание сделано для интервала времени

$$t = \frac{t_r}{\sqrt{1-\beta^2}}, \quad (15)$$

так как для него часы, к которым относятся все сообщения движущегося наблюдателя, идут в этом отношении медленнее, чем его собственные. Согласно его точке зрения средняя ошибка снижается до

$$\Delta q = \sqrt{1-\beta^2} \sqrt{\frac{ht \sqrt{1-\beta^2}}{2\pi m_r}} = \sqrt{1-\beta^2} \sqrt{\frac{ht_r}{2\pi m_r}}. \quad (16)$$

Она, стало быть, меньше и стремится к нулю с приближением к скорости света, причем не только из-за того, что масса m стремится к бесконечности. Максимальная точность неограниченно возрастала бы при приближении к скорости света также для случая серии точечных масс, которые двигались бы все быстрее, имея все меньшую массу покоя, таким образом, чтобы масса движения m имела бы то же самое значение. Это представляется вполне удовлетворительным, так как только что описанный предельный процесс является как раз тем, посредством которого надеются получить правильное выражение для квантов света. Действительно, так как максвелловские волны не испытывают дисперсии, для световых квантов неограниченно долго сохраняется достигнутая вначале точность в определении местонахождения и ее можно неограниченно повышать, поскольку связанное с этим сильное импульсное рассеяние не оказывает вредного влияния.

Доложено 5 июня 1930 г.

О СВОБОДНОМ ДВИЖЕНИИ В РЕЛЯТИВИСТСКОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ ¹

1. Содержанием настоящего сообщения являются некоторые результаты применения операторного исчисления к такой физической системе (называемой обычно электроном Дирака), которая описывается волновым уравнением Дирака

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t} + H\psi = 0, \quad (1)$$

где

$$H = c\alpha_1 p_1 + c\alpha_2 p_2 + c\alpha_3 p_3 + \alpha_4 mc^2. \quad (2)$$

Мы ограничимся случаем, когда внешнее поле отсутствует, так как нас интересует именно то, что система Дирака ведет себя относительно сложно даже при отсутствии внешних сил. Согласно Брейту *, оператор Гамильтона (2) сопоставляют со следующими выражениями для лоренцевой энергии электрона:

$$\frac{mc^2}{\sqrt{1-\beta^2}} = v_x \cdot \frac{mv_x}{\sqrt{1-\beta^2}} + v_y \cdot \frac{mv_y}{\sqrt{1-\beta^2}} + v_z \cdot \frac{mv_z}{\sqrt{1-\beta^2}} + \sqrt{1-\beta^2} \cdot mc^2.$$

При этом в определенном смысле соответствуют: $c\alpha_1, c\alpha_2, c\alpha_3$ — компонентам скорости v_x, v_y, v_z ; α_4 — $\sqrt{1-\beta^2}$ **; p_1, p_2, p_3 — компонентам импульса $\frac{mv_x}{\sqrt{1-\beta^2}}$ и т. д. Величины $m, c, \hbar$ являются хорошо известными физическими константами.

Особенность выражения (2) заключается в том, что оно, согласно Дираку, предполагает отсутствие обычной взаимосвязи между скоростью и импульсом. Неверным, например, будет выражение

$$\alpha_1 = \frac{\alpha_4 p_3}{m}.$$

Более того, понятие скорости уравнивается в правах с понятием импульса и становится самостоятельным. В уравнении (1) через p_1, p_2, p_3 обозначены операторы $\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_3}$, а через $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4$ — операторы, которые,

¹ E. Schrödinger. Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss., 1930, 418. Перевод А. М. Погали.

* G. Breit. Proc. Amer. Acad., 1928, 14, 553.

** Мне хотелось бы придерживаться точки зрения Брейта вопреки В. Фоку (Z. Phys., 1929, 55, 127, примечание на с. 129), особенно из-за роли, которую играет α_4 при преобразованиях Лоренца (J. v. Neumann. Z. Phys., 1929, 48, 868).

как чаще всего принимают, действуют только на пятую переменную ζ . От нее, как и от x_1, x_2, x_3, t , зависит функция ψ . Это «пятое измерение» имеет только четыре дискретных значения, т. е. оно является индексом, а каждое значение функции ψ по-прежнему существует с четырьмя различными индексами (которые, однако, не могут быть поставлены в соответствие четырем мировым координатам!). В волновом уравнении (1) операторы α_k представляют собой квадратные четырехрядные эрмитовы матрицы, причем матричными элементами являются постоянные раз и навсегда фиксированные числа, как 1, -1 , $\sqrt{-1}$ и т. д. Следовательно, действие, например, оператора α_2 на ψ означает, что $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$ заменяются определенными линейными комбинациями из $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$ (аргументы x_1, x_2, x_3, t остаются теми же). Матрицы α_i выбраны так, что каждая из них при возведении в квадрат дает единичную матрицу, в то время как они между собой являются «косокоммутативными»:

$$\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = 2\delta_{ik} 1 \quad (i, k = 1, 2, 3, 4). \quad (3)$$

К этому фундаментальному и имеющему большие последствия требованию приходят, стремясь к тому, чтобы уравнение (1) посредством «возведения в квадрат» вело к скалярному релятивистскому волновому уравнению * для каждой функции ψ_i .

Множество решений уравнения (1) является настолько большим, что здесь метод волновой механики, заключающийся в исследовании поведения специальных, характерных решений, не подходит для получения результатов, представляющих достаточно общий интерес. Для этого особенно подходящим является метод q -чисел, или метод операторного исчисления. Недавно я указал на методическое противоречие **. Уловка операторного исчисления состоит в том, что изменение во времени функции ψ переносят на операторы. Таким образом, в расчет в известной степени принимают только одну-единственную ψ -функцию, для определенности, например, ту, которая относится к $t=0$. К тому же самому моменту времени будет относиться принятое соответствие операторов обозначениям α_k, p_k и т. д. Спросим теперь, как нужно изменять во времени операторы, чтобы они, будучи связаны с неизменяющейся во времени функцией ψ , привели к тем же физическим выводам, к которым приходят, соблюдая операторное соответствие и изменяя ψ согласно уравнению (1)? К счастью, оказывается, что ответ на этот вопрос совершенно не связан с начальным распределением ψ -функции, которое (не принимая во внимание условия нормировки $\int \psi^* \psi dx = 1$) остается полностью произвольным. Кроме того, ответ этот оказывается одним и тем же для любого произвольно взятого оператора A ; он, как известно, заключается в следующем:

$$\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{dA}{dt} = HA - AH. \quad (4)$$

* См. работу автора: Abhandlungen zur Wellenmechanik. 2 Aufl., S. 1, 12, 162, 178.

** Настоящие «Sitzungsberichte», S. 300. [см. ссылку ¹ на с. 218 наст. изд.].

Я не могу удержаться, чтобы не изложить краткое доказательство этого результата, хотя оно в настоящее время и известно узкому кругу специалистов. Для краткости будем считать всегда

$$\kappa = \frac{h}{2\pi i}.$$

Общее решение уравнения (1) имеет вид

$$\psi(x_1, x_2, x_3, \zeta, t) = e^{\frac{Ht}{\kappa}} \psi(x_1, x_2, x_3, \zeta, 0). \quad (5)$$

Здесь H является оператором (не зависимым, разумеется, от времени; ведь уравнение (5) мы понимаем «волномеханически»), t — обычное время (не оператор); оператор $e^{\frac{Ht}{\kappa}}$ также не вызывает недоразумений. Решение для заданной функции $\psi(x_1, x_2, x_3, \zeta, 0)$, очевидно, является однозначным.

Операторное уравнение (4) также имеет однозначное общее решение. Оно, прежде всего в частном случае $A=H$, требует, чтобы H являлся постоянным (также и в смысле операторного исчисления, так как это заранее не установлено, но уравнение (4) этого требует). Если это задано, то решением уравнения (4) для любого A будет

$$A(t) = e^{\frac{Ht}{\kappa}} A(0) e^{-\frac{Ht}{\kappa}}, \quad (6)$$

и решение это, очевидно, является однозначным.

Теперь можно показать, что, связывая известным способом $A(t)$ с $\psi(0)$ для определения математического ожидания $\bar{A}$, получим тот же результат, как и в случае $A(0)$ и $\psi(t)$. Это все, что требуется. Таким образом, нужно показать, что

$$\int \psi^*(0) \cdot A(t) \psi(0) dx = \int \psi^*(t) A(0) \psi(t) dx,$$

т. е. согласно (5) и (6)

$$\int \psi^*(0) \cdot e^{\frac{Ht}{\kappa}} A(0) e^{-\frac{Ht}{\kappa}} \psi(0) dx = \int e^{\frac{H^*t}{\kappa}} \psi^*(0) A(0) e^{-\frac{Ht}{\kappa}} \psi(0) dx.$$

То, что это правильно, становится понятным, если справа перевести действие оператора $e^{\frac{H^*t}{\kappa}}$ с первого сомножителя на второй, причем необходимо только «переставить строки и столбцы». Это значит, что из H^* получится H , если оператор H является эрмитовым.

Доказательство требует только что употребленной эрмитовости оператора H , а также и того, чтобы в нем время явно не содержалось (в противном случае (5) не было бы решением уравнения (1)). В остальном оператор H может быть каким угодно.

Перестановочные соотношения с постоянной правой частью (как, например, соотношения (3)) сохраняются для всех моментов времени также и в операторном исчислении. Не проводя вычислений, можно легко в этом убедиться, воспользовавшись решением (6). В соответствии с ним оператор, который к моменту времени $t=0$ (или вообще к любому моменту времени) был равен нулю или единице (или вообще коммутировал с H), остается, очевидно, постоянным во времени. Впрочем, мы занимаемся сейчас исключительно основным уравнением (4), к чему добавляем лишь толкование H с помощью (2), перестановочные соотношения (3), а также хорошо известные перестановочные соотношения p_k с операторами x_k

$$p_k x_i - x_i p_k = x_i \delta_{ik} \cdot 1. \quad (7)$$

2. Если образовать в соответствии с (3) производные координат* по времени, например $\dot{x}_k$, то, учитывая (2), (3) и (7), получим

$$\frac{dx_k}{dt} = c \alpha_k \quad (k = 1, 2, 3). \quad (8)$$

Этот результат вызывал удивление, а именно потому, что

$$\left(\frac{dx_k}{dt}\right)^2 = c^2 \alpha_k^2 = c^2 \cdot 1$$

(см.: Брейт, цит. соч; Фок, цит. соч.).

Квадрат каждой компоненты скорости может, следовательно, принимать только значение c^2 , причем наряду с этим он должен в таком случае являться также средним значением (математическим ожиданием) для многих измерений на одном и том же волновом пакете. Сама компонента скорости допускает лишь значения $\pm c$. Ее математическое ожидание может быть и в общем будет меньшим. Тем не менее для него ожидают порядок величины c и удивляются, как это может удаваться центру тяжести облака заряда двигаться всегда так быстро и все же при известных условиях перемещаться поступательно только с умеренной скоростью. Это, очевидно, возможно потому, что он не движется прямолинейно.

В самом деле, согласно (4), α_k не являются постоянными, так как они не коммутируют с H . Из соотношений (2) и (3) ** получаем

$$H \alpha_k + \alpha_k H = 2 c p_k \quad (k = 1, 2, 3); \quad (9)$$

следовательно, согласно (4)

$$x \frac{d\alpha_k}{dt} = H \alpha_k - \alpha_k H = 2 (c p_k - \alpha_k H) = 2 (H \alpha_k - c p_k) \quad (k = 1, 2, 3). \quad (10)$$

* Далее выражения «координата», «импульс», «энергия» и др. обозначают соответствующие операторы. Только t и физические константы являются обычными числами.

** α_k коммутируют с x_i и p_i , поскольку они действуют на совершенно другую переменную.

Так как компоненты импульса p_k коммутируют с H , т. е. постоянны во времени, это уравнение содержит только переменные α_k и интегрируется. Введем для α_k переменную η_k

$$\eta_k = \alpha_k - cH^{-1}p_k \quad (k=1, 2, 3). \quad (11)$$

Тогда

$$x \frac{d\eta_k}{dt} = -2\eta_k H = 2H\eta_k. \quad (12)$$

Интегрируя, получим

$$\eta_k = \eta_k^0 e^{-\frac{2Ht}{x}} = e^{\frac{2Ht}{x}} \cdot \eta_k^0, \quad (13)$$

где η_k^0 является «значением» η_k (т. е. видом оператора η_k) для $t=0$. Согласно (12) η_k и, разумеется, также η_k^0 косокоммутируют * с H . Все косокоммутирующие с H операторы зависят наподобие (13) от параметра времени, что следует непосредственно из (6), и обладают постоянным квадратом. Введя в (13) в соответствии с (11) снова α_k и подставив найденное для α_k значение в (8), получим

$$\frac{dx_k}{dt} = c^2 H^{-1} p_k + c \eta_k^0 \cdot e^{-\frac{2Ht}{x}}. \quad (14)$$

После интегрирования получим

$$x_k = a_k + c^2 H^{-1} p_k t - \frac{cx}{2} \eta_k^0 H^{-1} e^{-\frac{2Ht}{x}}, \quad (15)$$

где a_k — постоянная интегрирования (оператор!). Мы не обозначаем ее через x_k^0 только потому, что она не является точным значением x_k для $t=0$.

Координата x_k состоит согласно (15) из двух слагаемых, для которых вводим особые обозначения:

$$\begin{aligned} x_k &= \tilde{x}_k + \xi_k, \\ \tilde{x}_k &= a_k + c^2 H^{-1} p_k t, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\xi_k = -\frac{cx}{2} \eta_k^0 H^{-1} e^{-\frac{2Ht}{x}} = -\frac{cx}{2} \eta_k H^{-1} = \frac{cx}{2} H^{-1} \eta_k.$$

Первое слагаемое $\tilde{x}_k$ растет линейно со временем, а именно со скоростью, соответствующей импульсу p_k . Постоянная a_k никак не связана с этой скоростью, которая отнюдь не должна иметь порядок величины c . В самом деле, если функция ψ («волновой пакет») образована суперпозицией только собственных функций энергии и импульса достаточно узкой области, т. е. из пло-

* При этом η_k^0 как «начальное значение» η_k по определению является постоянным, но не коммутирует с H . Кстати говоря, также и в обычной механике начальное значение x_0 координаты x является постоянным, из чего отнюдь не следует, что $\left(\frac{dx}{dt}\right)_0$ обращается в нуль.

ских волн узкой области длин волн и волновых нормалей, то оператор $c^2 H^{-1} p_k$ сводится к умножению на

$$c^2 \cdot \frac{\sqrt{1-\beta^2}}{mc^2} \cdot \frac{mv_k}{\sqrt{1-\beta^2}} = v_k,$$

причем v_k и β обычным образом, получившим экспериментальное подтверждение, связаны с дебройлевской длиной волны (но не с α_k , как в случае соответствия, о котором говорилось в начале статьи).

Однако надо еще принять во внимание второе слагаемое ξ_k , которое имеет явно периодический характер ($\kappa = \hbar/2\pi i$ является чисто мнимым), точнее, весьма сложный «почти периодический» характер. Величина $c\alpha_k$ является скоростью этого высокочастотного, быстрого дрожательного движения (Zitterbewegung) малой амплитуды (см. дальше), которое накладывается на прямолинейное равномерное движение. Можно также сказать, что $c\alpha_k$ является мгновенной скоростью центра тяжести облака заряда. В самом деле, для очень коротких промежутков времени x_k задается совершенно другой линейной функцией. Разлагая в (15) экспоненциальную функцию и объединяя полученный линейный член с тем линейным членом, который уже там имеется, получим, разумеется, $c\alpha_k^0 t$, так как иначе (15) не было бы решением уравнения (8). Итак, $c^2 H^{-1} p_k$ является, так сказать, макроскопической скоростью, а $c\alpha_k$ — микроскопической скоростью электрона или, выражаясь более образно, математические ожидания этих операторов дают макроскопическую и микроскопическую скорости центра тяжести облака заряда.

Значительный интерес представляет амплитуда дрожательного движения. Ее можно согласно (16) оценить следующим образом:

$$\xi_k = \frac{c\kappa}{2} H^{-1} \eta_k. \quad (16')$$

Так же как α_k , η_k является «величиной порядка 1», H для медленно движущихся электронов имеет порядок величины mc^2 , $\kappa = \hbar/2\pi i$. Математическое ожидание ξ_k имеет, таким образом, порядок величины

$$\xi_k \sim \frac{\hbar}{4\pi mc} \sim 10^{-11} \text{ см.} \quad (17)$$

Это совпадает с известной критической длиной (комптоновской длиной волны), к которой согласно соотношению неопределенности нельзя свести волновой пакет, не принимая во внимание огромной величины флуктуации импульса (mc). Для электрона с определенной до некоторой степени макроскопической скоростью отклонения центра тяжести от прямолинейной траектории будут намного меньшими протяженности облака заряда. Еще более точную оценку можно получить путем возведения в квадрат выражения (16'), так как ξ_k , как и η_k , косокоммутирует с H и обладает постоянным квадратом

$$\xi_k^2 = -\frac{c^2 \kappa^2}{4} H^{-2} \eta_k^2.$$

Согласно (11) имеем

$$\begin{aligned} H\eta_k &= H\alpha_k - cp_k, & \eta_k H &= \alpha_k H - cp_k, \\ H^2\eta_k^2 &= H^2 - cp_k(H\alpha_k + \alpha_k H) + c^2p_k^2, \end{aligned}$$

или, принимая во внимание (9),

$$H^2\eta_k^2 = H^2 - c^2p_k^2.$$

Поэтому

$$\xi_k^2 = \frac{h^2c^2}{16\pi^2} H^{-2} (1 - H^{-2}c^2p_k^2). \quad (18)$$

Применяя полученное соотношение к волновому образованию с единым до некоторой степени энергией-импульсом, с помощью аналогичных рассуждений получим

$$\bar{\xi}_k^2 = \frac{h^2}{16\pi^2 m^2 c^2} (1 - \beta_k^2) (1 - \beta^2), \quad (19)$$

причем β и β_k , связанные с энергией и импульсом, являются соответственно полной скоростью и ее k -компонентой и не имеют никакого отношения к α_k . Следовательно, с приближением к скорости света амплитуда дрожательного движения уменьшается.

Необходимо, впрочем, предостеречь от следующей напрашивающейся ошибки. Согласно (16)

$$\bar{\xi}_k = \bar{x}_k - \bar{\tilde{x}}_k$$

или, написав еще точнее,

$$\bar{\xi}_k = \overline{x_k - \tilde{x}_k},$$

т. е. $\bar{\xi}_k$ является средним расстоянием облака заряда до плоскости, перпендикулярной k -направлению; точка пересечения соответствующего перпендикуляра с этой плоскостью имеет в качестве координат математические ожидания $\bar{\tilde{x}}_k$ (c -числа!) и движется прямолинейно и равномерно. Однако ни в коем случае $\bar{\xi}_k^2$ не является средним квадратом этого расстояния для точек облака заряда. Иначе из (18) обнаружилось бы, что уравнения Дирака допускают только облака заряда с линейным размером $h/4\pi mc$ — не больше и не меньше. Это было бы явной нелепостью. Скорее дело обстоит следующим образом. Истинная описываемая операторами x_k статистика положения (облако заряда) косвенно описывается через статистику положения воображаемой точки $\tilde{x}_k$. Эта статистика мало отличается от первой и, кроме того, несколько проще, поскольку она соответствует в среднем прямолинейному и равномерному движению и не содержит операторов, действующих на координату ζ . В таком случае ξ_k описывает статистику истинного положения относительно воображаемого. Каждая точка воображаемого облака заряда некоторым образом еще раз рассеивается в небольшое облако заряда, причем рассеяние это происходит одинаково для всех точек. Это небольшое облако заряда явля-

ется облаком, которое имеет линейные размеры порядка $\hbar/4\pi mc$ и постоянные, — не зависящие от времени квадратичные моменты относительно воображаемой точки *.

3. Существует тенденция рассматривать описанную посредством ξ_k статистику положения как истинную модель внутренней структуры электрона «после смены трансляции» («nach Ablösung der Translation»). Можно попытаться связать с ней явление спина. К понятию спина приводит то обстоятельство, что оператор момента импульса даже при свободном движении не является постоянным, постоянной в этом случае является векторная сумма этого и некоторого другого операторов **. Теперь мы будем пользоваться трехмерной векторной символикой. Величины $p, \alpha, x, \tilde{x}, \xi, \eta$ и др. без индекса будут 3-векторами с компонентами $p_1, p_2, p_3, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ и т. д., кроме того, $(\alpha \cdot p) = \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3$ будет обозначать скалярное, а $[\alpha \cdot p]$ с компонентами $\alpha_2 p_3 - \alpha_3 p_2$ и др. — векторное произведение. При этом следует помнить, что векторное произведение вектора на самого себя в общем не равняется нулю и что при дифференцировании следует обращать внимание на последовательность множителей, например

$$\frac{d}{dt} [\alpha \cdot \alpha] = \left[\frac{d\alpha}{dt} \cdot \alpha \right] + \left[\alpha \cdot \frac{d\alpha}{dt} \right]. \quad (20)$$

Запишем уравнения (10) в векторной форме в виде

$$\frac{\kappa}{2} \frac{d\alpha}{dt} = H\alpha - cp, \quad \frac{\kappa}{2} \frac{d\alpha}{dt} = cp - \bar{\alpha}H \quad (10)$$

и умножим первое справа, а второе слева векторно на α и сложим. Так как α коммутирует с p , в их векторном произведении порядок изменяет лишь знак. Вследствие общего уравнения (4) имеем

$$\frac{\kappa}{2} \frac{d}{dt} [\alpha \cdot \alpha] = \kappa \frac{d}{dt} [\alpha \cdot \alpha] + 2c [\alpha \cdot p],$$

или

$$\frac{\kappa}{4} \frac{d}{dt} [\alpha \cdot \alpha] = -c [\alpha \cdot p] = -\frac{d}{dt} [x \cdot p]. \quad (21)$$

Последнее уравнение следует из (8) и из постоянства p . Таким образом, имеем

$$[x \cdot p] + \frac{\kappa}{4} [\alpha \cdot \alpha] = \text{const.} \quad (22)$$

$[x \cdot p]$ является, в соответствии с классическим определением, моментом импульса («орбитальным моментом»). Мы видим, что он при свободном движении,

* Не только ξ , но и $\xi_k \xi_l$ для $k \neq l$ являются постоянными. Это следует из их косокоммутируемости с H : $\kappa \frac{d}{dt} (\xi_k \xi_l) = H \xi_k \xi_l - \xi_k \xi_l H = -\xi_k H \xi_l - \xi_k \xi_l H = -\xi_k (H \xi_l + \xi_l H) = 0$.

** О том, что необходимо различать между орбитальным и спиновым моментами при отсутствии внешнего поля, указали недавно Э. Фюс и Г. Геллман в интересной работе (Z. Phys., 1930, 31, 465), с которой настоящая работа при совершенно различной методике имеет много внутренних точек соприкосновения.

которое мы здесь рассматриваем, сам по себе не постоянен, но постоянна лишь указанная выше сумма. Уже только это обстоятельство (если отвлечься от дополнительных членов в H , которые впервые появляются в поле) оправдывает наименование этого вектора «экстрамоментом» импульса («спиновым моментом»). Третья компонента его, например, имеет вид

$$\frac{\hbar}{8\pi i} (\alpha_1 \alpha_2 - \alpha_2 \alpha_1) = \frac{\hbar}{4\pi i} \alpha_1 \alpha_2 = \frac{\hbar}{4\pi} s_3.$$

Таким образом, мы вводим новый вектор s соотношениями

$$\alpha_1 \alpha_2 = i s_3 \quad \text{и т. д.} \quad \text{или} \quad [\alpha \cdot \alpha] = 2is. \quad (23)$$

(Его компоненты эрмитовы, так как компоненты $[\alpha \cdot \alpha]$ как коммутаторы косоэрмитовы).

Следующие соотношения легко проверить:

$$[s \cdot s] = -2is, \quad [\alpha \cdot s] = +[s \cdot \alpha] = 2i\alpha, \\ s_1^2 = s_2^2 = s_3^2 = 1. \quad (24)$$

Следовательно, s_k имеют, как и α_k , лишь собственные значения ± 1 . Итак, уравнение (21) теперь можно представить в виде

$$\frac{\hbar}{4\pi} \frac{ds}{dt} = -c(\alpha \cdot p). \quad (22')$$

Компоненты $[\alpha \cdot p]$ относятся к косокоммутирующим с H величинам; в самом деле,

$$H[\alpha \cdot p] + [\alpha \cdot p]H = (H\alpha + \alpha H, p) = 2c[p \cdot p] = 0.$$

(При этом использовано (9), а также и то обстоятельство, что p_k коммутируют между собой и с H). Следовательно, они зависят от времени подобно (13):

$$[\alpha \cdot p] = [\alpha \cdot p]_0 e^{-\frac{2Ht}{\hbar}} = e^{\frac{2Ht}{\hbar}} [\alpha \cdot p]_0. \quad (25)$$

Подставляя это в (22') и интегрируя, получим

$$\frac{\hbar}{4\pi} s = \frac{\hbar}{4\pi} s + \frac{c\hbar}{2} [\alpha \cdot p]_0 H^{-1} e^{-\frac{2Ht}{\hbar}}, \quad (26)$$

причем: $\tilde{s}$ — постоянная интегрирования (оператор и вектор), которая просто связана с «начальными значениями» величин s , α и p *. Этим соотношением вполне определяется переменная составляющая спинового момента. Если макроскопическая скорость $c^2 H^{-1} p$ мала по сравнению со скоростью света,

* Именно, очевидно, $\tilde{s} = s_0 + ic[\alpha \cdot p]_0 H^{-1}$.

то амплитуда переменной составляющей s мала по сравнению с амплитудой постоянной компоненты. Она является величиной первого порядка по β . Вместо (26) в соответствии с (25) можно написать

$$\frac{\hbar}{4\pi} s = \frac{\hbar}{4\pi} \tilde{s} + \frac{\hbar}{4\pi i} [\alpha \cdot cH^{-1}p], \quad (26')$$

причем s и α — величины первого порядка (собственные значения ± 1), $cH^{-1}p$ имеет порядок β . Умножая (26') скалярно на p и применяя к смешанному произведению переместительный закон векторной алгебры, получим

$$(sp) = (\tilde{s}p) = \text{const.} \quad (27)$$

Таким образом, компонента спина в направлении (линейного) импульса постоянна. Это следует уже из (22'), так как скорость изменения s «перпендикулярна p ». Необходимо, конечно, быть осторожным при таких выводах, т. е. обращать внимание на некоммутативность. Например, скалярное произведение s на другой сомножитель (sa) не будет постоянным, в чем можно легко убедиться.

Чтобы установить взаимосвязь спина с нашей «внутренней статистикой положения» ξ_k , возьмем выражение (16)

$$\xi = \frac{c\kappa}{2} H^{-1}\eta = \frac{ch}{4\pi i} H^{-1}\eta \quad (16')$$

и умножим его векторно справа на p :

$$[\xi \cdot p] = \frac{ch}{4\pi i} H^{-1}[\eta \cdot p].$$

Вследствие (11)

$$\eta = \alpha - cH^{-1}p \quad (11')$$

найдем

$$[\xi \cdot p] = \frac{ch}{4\pi i} H^{-1}[\alpha \cdot p] = -\frac{h}{4\pi i} [\alpha \cdot cH^{-1}p]. \quad (28)$$

Получили переменную часть импульса спина с противоположным знаком (см. (26')), т. е. $[\xi \cdot p]$ — переменная часть орбитального импульса, что, впрочем, непосредственно следует из (16), так как $[\tilde{x}p]$ постоянно.

Спрашивается, можно ли образовать постоянную часть импульса спина, комбинируя «плечо силы ξ » с подходящим образом выбранным линейным импульсом. Для этого величину импульса, которая относится к собственной («микроскопической») скорости $c\alpha$, представляют образованной из нее умножением на H/c^2 . Удобнее для вычислений попытаться сначала умножить это отношение на $c\eta$ вместо $c\alpha$, т. е. на макроскопическую скорость. Таким образом, мы выбираем в качестве «микроимпульса»

$$\frac{\eta H}{c}$$

и вычисляем согласно (16') и (12')

$$\begin{aligned} \left[\xi \cdot \frac{\eta H}{c} \right] &= \frac{h}{4\pi i} [\eta \cdot \eta] = \frac{h}{4\pi i} \{ [\alpha \cdot \alpha] - [\alpha \cdot cH^{-1}p] - [cH^{-1}p \cdot \alpha] \} = \\ &= \frac{h}{4\pi i} \{ [\alpha \cdot \alpha] - 2[\alpha \cdot cH^{-1}p] \}. \end{aligned} \quad (29)$$

(Две перемены знака при этом компенсируются, α «косокоммутирует с H с точностью до коммутатора $\text{const} \cdot p$ », см. (9).) Следовательно, согласно (23)

$$\left[\xi \cdot \frac{\eta H}{c} \right] = \frac{h}{2\pi} s - \frac{h}{2\pi i} [\alpha \cdot cH^{-1}p] = 2 \frac{h}{4\pi} \cdot \tilde{s} \quad (30)$$

(см. (26')).

Так как η и H косокоммутируют, то ηH косоэрмитово. Также эрмитово векторное произведение, поскольку, как показывает (29), оно по существу представляет собой коммутатор. Таким образом, постоянная часть момента импульса спина получается удвоенной. Как мне кажется, этот совершенно неожиданный результат нельзя устранить с помощью какой-либо перестановки множителей или использования α вместо η , а только комбинированием плеча силы ξ с половиной употребляемого выше микроимпульса, так как при небольшой макроскопической скорости всегда появляется удвоенное векторное произведение $[\alpha \cdot \alpha]$. В частности, полный спин также появляется как векторное произведение ξ на импульс, который (имеется в виду при малой макроскопической скорости) только наполовину меньше введенного выше. Из (28) и (30) легко приходим к выражению

$$\frac{h}{4\pi} s = \left[\xi, \left(\frac{\eta H}{2c} - p \right) \right],$$

которое согласно (9) и (11) может быть представлено в различных выражениях, однако не удастся выразить s через ξ и η или через ξ и α в отдельности без p .

На редкость запутанные отношения, которые согласно уравнению Дирака имеются уже при свободном движении материальной точки, кажутся мне достойными изложения, хотя я не могу представить сколько-нибудь завершённого результата этого исследования.

Доложено 17 июля 1930 г.

ОСНОВНАЯ ИДЕЯ ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКИ¹

Когда луч света проходит через оптический прибор, например трубу или фотографический объектив, он испытывает на каждой преломляющей или отражающей поверхности изменение направления. Мы можем построить ход луча, если известны оба простых закона, которые управляют этими изменениями направления: закон преломления, открытый двести лет назад Снеллиусом, и закон отражения, известный уже больше чем две тысячи лет назад

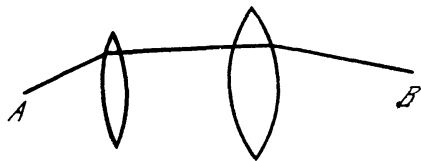


Рис. 1

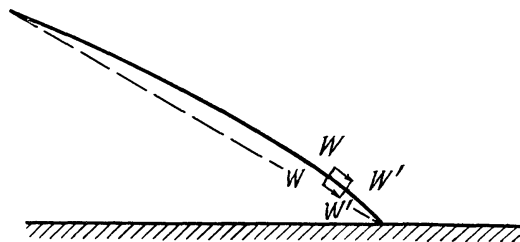


Рис. 2

Архимеду. На рис. 1 показан простой пример луча $A-B$, который испытывает преломление, подчиняющееся закону Снеллиуса на каждой из четырех граничных поверхностей двух линз.

Ферма сформулировал закон распространения луча света с гораздо более общей точки зрения. Свет распространяется в различных средах с различной скоростью, и путь луча определяется так, как будто бы лучу было важно возможно быстрее достигнуть той точки, в которую он приходит. (Заметим при этом, что за начальную и конечную точки можно взять любые две точки вдоль луча.) Дальнейшее отклонение от действительного пути означало бы замедление. В этом заключается знаменитый принцип кратчайшего оптического пути Ферма, замечательным образом определяющий всю судьбу светового луча в одном-единственном положении, даже и в том случае, если свойства среды изменяются не скачком на какой-либо поверхности, а постепенно, от точки к точке. Примером последнего является земная атмосфера. Чем глубже проникает в нее падающий извне луч света, тем медленнее распространяется он во все более и более плотном воздухе; хотя разница в скорости распространения и будет чрезвычайно незначительной, принцип Ферма все же требует при этом, чтобы путь луча света был вогнутым по отношению

¹ *E. Schrödinger. In: Die moderne Atomtheorie. Leipzig, 1934, S. 19. См. также в кн.: В. Гейзенберг, Э. Шредингер, П. Дирак. Современная квантовая механика. М.—Л., 1934, с. 41—60; в кн.: Э. Шредингер. Новые пути в физике. М., «Наука», 1971, с. 46—61. Перевод Д. Д. Иваненко.*

к Земле (рис. 2), ибо тогда луч несколько дольше будет задерживаться в вышних, «более быстрых» слоях и придет к цели скорее, чем на более коротком прямом пути (на рисунке нанесен пунктиром; небольшой четырехугольник $WWW'W'$ пока не играет роли).

Я думаю, вы все замечали, что Солнце, находясь у горизонта, кажется не круглым, а сплюснутым, так что вертикальный диаметр представляется укороченным. Это также следствие искривления лучей. Согласно волновой теории света лучи имеют, собственно говоря, только фиктивное значение. Они не являются физическими траекториями каких бы то ни было световых частиц, но лишь математическим вспомогательным построением, так называемыми ортогональными траекториями волновых поверхностей, т. е. также

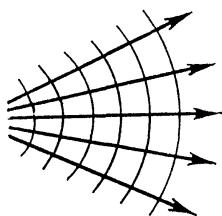


Рис. 3

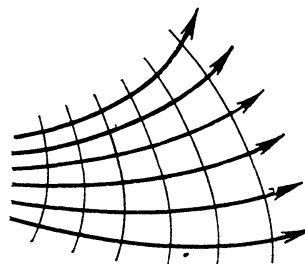


Рис. 4

воображаемыми линиями; последние направлены в каждой точке перпендикулярно волновой поверхности в ту сторону, в которую движется последняя (рис. 3, на котором изображен простейший случай концентрических шаровых волновых поверхностей и, следовательно, прямых лучей, тогда как рис. 4 разъясняет случай криволинейных лучей). Представляется удивительным, что столь важный всеобщий принцип относится непосредственно к этим математическим вспомогательным линиям, а не к волновым поверхностям, ввиду чего принцип Ферма можно было бы рассматривать как некоторый математический курьез. На самом деле все обстоит совершенно иначе. Только с точки зрения волновой теории принцип Ферма становится вполне понятным и перестает быть чудом. Действительно, с волновой точки зрения так называемая кривизна луча света гораздо более понятна, чем поворот волновой поверхности, который тривиальным образом должен иметь место, если соседние части волновой поверхности распространяются с различной скоростью; точно так же, например, если рота солдат выполняет команду «захождения направо», то солдаты делают шаги различной величины: правофланговый — наименьший, левофланговый — наибольший шаг. В нашем примере с преломлением луча в земной атмосфере (см. рис. 2) кусочек волновой поверхности WW должен обязательно проделать поворот направо к $W'W'$, так как его левая часть лежит в более высоком слое менее плотного воздуха и поэтому движется быстрее, чем правая часть, лежащая ниже *.

* Укажем, кстати, здесь на случай, для которого представление Снеллиуса оказывается неприменимым. Направленный горизонтально луч света, казалось, должен был бы оставаться горизонтальным, ибо ведь в горизонтальном направлении показатель преломле-

При ближайшем рассмотрении оказывается, что принцип Ферма по своему содержанию совершенно эквивалентен тривиальному и само собой разумеющемуся утверждению, что при заданной переменной от точки к точке скорости света фронт волны должен загигаться указанным образом. Я не имею возможности доказывать это здесь, но попытаюсь сделать указанное утверждение правдоподобным. Вернемся опять к примеру марширующего отряда солдат. Пусть для того, чтобы сохранить полную правильность фронта, солдаты соединены длинной палкой, которую каждый крепко держит в руках. Сейчас ничего не будет говориться о захождении, команда гласит просто: «пусть каждый идет или бежит как можно быстрее». Если характер рельефа почвы медленно меняется от точки к точке, то сначала, скажем, правое, затем левое крыло фронта будет двигаться быстрее, и сами собой будут осуществляться повороты фронта. Через некоторое время мы заметим, что пройденный путь не является прямолинейным, а был как-то искривлен. Тот факт, что этот криволинейный путь в точности совпадает с кратчайшим в смысле времени прибытия в данный пункт при заданном рельефе, является по меньшей мере весьма правдоподобным, поскольку каждый солдат старался двигаться как можно быстрее. Отметим также, что поворот фронта всегда происходит в том направлении, в котором рельеф становится более тяжелым, поэтому в конце концов все выглядит так, как будто солдаты нарочно «обошли кругом» то место, где они должны были бы двигаться медленнее.

Таким образом, принцип Ферма представляется просто тривиальной квинт-эссенцией волновой теории. Поэтому совершенно удивительным показалось открытие, сделанное в один прекрасный день Гамильтоном, что и действительное движение материальных точек в силовом поле (например, планет вокруг Солнца или брошенного камня в поле тяжести Земли) подчиняется совершенно такому же общему принципу, получившему имя своего автора и сделавшему последнего знаменитым. Хотя принцип Гамильтона и не говорит совсем точно, что материальная точка выбирает наиболее быстрый путь, но его утверждение столь близко аналогии с принципом кратчайшего оптического пути, столь непосредственно, что является загадочным. Казалось, что природа как будто осуществила одну и ту же закономерность двумя различными способами. Один раз — в случае света при помощи довольно ясной игры волн, другой раз — в случае материальных точек, где положение вещей было непонятно, если только не стараться и здесь также говорить о волновой природе. Последнее предположение казалось сперва совершенно исключенным, ибо «материальные точки», на которых были подтверждены законы механики, в то время были просто большими видимыми телами, частью очень большими, например планетами, и говорить о чем-то вроде их «волновой природы» вовсе не представлялось возможным.

Мельчайшие последние частицы материи, которые мы сейчас с гораздо большим правом называем «материальными точками», казались тогда еще

ния не меняется. В действительности же горизонтальный луч искривляется больше всякого другого, что непосредственно видно из представления о загигающемся волновом фронте.

чем-то совершенно гипотетическим. Только после открытия радиоактивности развитие экспериментальной техники привело к тому, что оказалось возможным изучать свойства отдельных корпускул, или частиц; в настоящее время возможно даже остроумным способом Вильсона фотографировать и (при помощи стереофотографии) весьма точно измерять пути отдельных частиц. В пределах точности этих измерений для движения корпускул подтверждаются те же механические законы, что и для больших тел, планет и т. д. Впрочем, выяснилось, что, конечно, ни молекула, ни отдельный атом не могут считаться «последними камнями» материи, но что и атом является весьма сложной системой. В нашем представлении возникли картины строения атомов из частиц, по-видимому, аналогичные картине планетной системы. Вполне естественно было попытаться сперва сохранить здесь те же законы движения, которые столь замечательно оправдались для больших тел. Это значит, что к внутреннему поведению атома также была применена механика Гамильтона, которая, как я указал выше, формулируется в гамильтоновом принципе. То обстоятельство, что этот принцип весьма аналогичен оптическому принципу Ферма, было почти совсем забыто. Если об этом и вспоминали, то усматривали здесь только забавную случайность математической теории.

Весьма трудно, не вдаваясь в детали, составить правильное представление о том, сколь успешным или неуспешным было применение этой классически-механической картины к атому. С одной стороны, принцип Гамильтона оказался надежнейшим и лучшим проводником, без которого просто нельзя было обойтись; с другой стороны, для правильного описания опытных фактов необходимо было допустить вмешательство совершенно новых, непонятных требований, так называемых квантовых условий и квантовых постулатов. Они звучали как грубые диссонансы в симфонии классической механики и все же странным образом казались созвучными ей.

Математически можно выразить это положение вещей следующим образом: в то время как принцип Гамильтона требует только, чтобы некоторый интеграл был минимумом, но не определяет значений этого минимума, квантовые же условия ограничивают значения минимума целыми, кратными универсальной мировой постоянной, именно планковской постоянной действия. Но это только побочное замечание. Положение вещей было довольно безнадежным. Если бы старая механика была совсем отброшена, дело не обстояло бы еще так скверно, у нас были бы открыты возможности для создания новой механики. Мы же стояли перед трудной задачей спасти сущность механики, чье дыхание ясно чувствовалось в микрокосмосе, и в то же время, так сказать, выпросить у нее признания квантовых условий в качестве вытекающих из ее оснований положений, а не грубых внешних требований.

Выход был найден в упоминавшейся уже возможности усмотреть в принципе Гамильтона такой же результат игры волн, который собственно и лежит в основе движения материальных точек, точно так же, как мы уже давно привыкли видеть волны в явлениях света с их принципом Ферма. Отдельная траектория материальной точки теряет, впрочем, вследствие этого свой непосредственный физический смысл и становится чем-то фиктивным, вроде отдельного изолированного луча света. Но сущность теории, минимальный

принцип не только остается незатронутым, но лишь при волновом способе рассмотрения раскрывает свое истинное простое значение, как уже указывалось выше. Новая теория, собственно говоря, вовсе не является новой, она представляет собой органическое продолжение, хотелось бы сказать, более тонкое толкование старой теории.

Но каким же образом могло привести это новое, более «тонкое» толкование к заметно иным результатам, как могло оно устранить трудности, встретившиеся в атоме, с которыми старая теория не могла справиться? Каким образом прежнее «грубое вмешательство» квантовых условий стало терпимым или даже оказалось связанным с развитием новых идей?

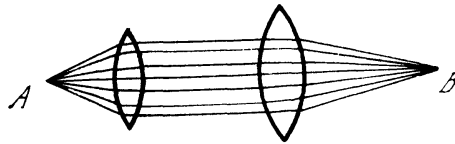


Рис. 5

Эти вопросы лучше всего разъяснить также путем оптической аналогии. Я назвал выше с полным правом принцип Ферма квинтэссенцией волновой теории света. Несмотря на это, он не может избавить нас от более точного изучения самого волнового процесса. Так называемые явления дифракции и интерференции можно понять, только проследив в деталях движение волн, так как при этом речь идет не только о том, в какой фазе придет она туда в данный момент времени. При старых, более грубых экспериментах эти явления играли роль только незначительных деталей и ускользали от наблюдения. Как только, однако, на них было обращено внимание и они были правильно, волновым образом, истолкованы, оказалось нетрудным придумать опыты, в которых волновая природа света проявляется не только в деталях, но совсем ясно во всем характере явления.

Позвольте мне разъяснить это на двух примерах таких оптических инструментов, как телескоп, микроскоп и т. д. Мы хотим получить при помощи последних резкое изображение, т. е. стремимся заставить сойтись в одной точке, так называемом фокусе, все лучи, исходящие из некоторой точки рассматриваемого объекта (рис. 5). Сначала казалось, что здесь имеются только трудности геометрической оптики, впрочем, достаточно серьезные. Позднее выяснилось, однако, что даже и у лучше сконструированных приборов соединение лучей гораздо хуже, чем следовало ожидать, принимая, что каждый луч, независимо от соседних, точно следует принципу Ферма. Свет, исходящий из некоторой точки объекта и воспринимаемый оптическим прибором, не соединяется позади последнего опять в одну точку, но распространяется на маленькую, так называемую дифракционную, окружность, которая, впрочем, оказывается в большинстве случаев кругом лишь потому, что края линз и экранов являются окружностями.

Причина этого явления, называемого дифракцией, состоит в том, что не все шаровые волны, исходящие из данной точки, могут быть

восприняты прибором. Края линз или экрана выделяют только часть волновых поверхностей (рис. 6), и, если позволено будет употребить наглядное выражение, пораженные части волн противятся строгому соединению в одной точке и порождают несколько размазанную или размытую картину. Размазанность тесным образом связана с длиной волны света и, ввиду этой глубокой теоретической причины, является совершенно неизбежной. Вначале едва отмеченная, эта принципиальная размазанность ограничивает разрешающую силу современного микроскопа, столь успешно поборовшего

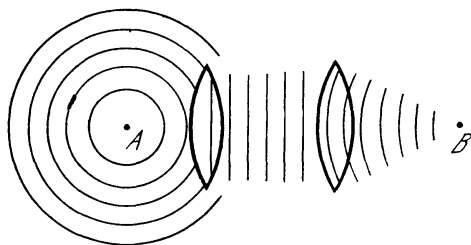


Рис. 6

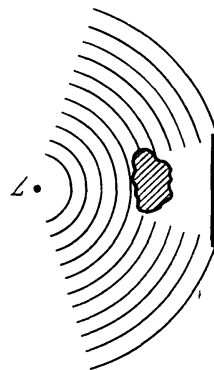


Рис. 7

все остальные трудности, стоявшие на пути к идеальному изображению. От объектов, которые не превосходят размерами длину волны или даже являются более тонкими, мы получаем изображения, имеющие отдаленное сходство с оригиналом или даже вовсе ему не соответствующие.

Вторым, еще более простым примером является тень, которую дает небольшой точечный источник света от непрозрачного предмета. Чтобы построить форму тени, мы должны проследить каждый луч света и посмотреть, не мешает ли ему непрозрачное тело достичь экрана. Край тени образуется теми лучами света, которые, проходя мимо, еще касаются края предмета. Из опыта известно, что край тени даже при точечном источнике света и совершенно резкой границе предмета, дающего тень, в действительности не будет резким. Причина этого совершенно та же, что и в прежнем случае. Фронт волны, так сказать, разрезается предметом (рис. 7), что приводит к образованию нерезкого края тени, который был бы непонятен, если бы отдельные лучи являлись самостоятельными и распространялись независимо друг от друга.

Это явление, которое также называется дифракцией, у больших тел вообще не слишком ярко выражено. Но если тело, дающее тень, имеет незначительные размеры, хотя бы в одном направлении, то дифракция будет проявляться, прежде всего, в том, что собственно тень вообще не будет наблюдаться, во-вторых же, и значительно ярче, в том, что этот небольшой предмет сам окажется светящимся и испускающим свет по всем направлениям (впрочем, преимущественно под малыми углами к падающему свету). Конечно, каждый из нас наблюдал так называемую солнечную пыль на пути луча

света, проникающего в темную комнату. Небольшие стебли травы и паутины на вершине холма, за которым прячется солнце, или волосы человека, стоящего против солнца, светятся часто замечательно красиво в диффрактированном свете, на чем покоится также возможность видеть дым и туман. Дело идет, собственно, не о самом теле, а о небольшой области в его непосредственной близости, в которой тело вызывает значительное возмущение падающего волнового фронта. Интересно и важно для дальнейшего отметить, что область возмущения всегда в каждом направлении имеет размеры одной или немногих длин волн, как бы ни был мал возмущающий предмет. Таким образом, здесь мы опять встречаем тесную связь явлений диффракции с длиной волны. Последнее будет, пожалуй, наиболее ясным образом иллюстрировано путем сравнения с другим волновым процессом, именно звуком. Благодаря значительно большей длине волны, измеряемой здесь сантиметрами и метрами, образование тени в случае звука отступает на задний план, а диффракция играет большую и также практически важную роль; действительно, мы можем хорошо слышать человека, стоящего за высокой стеной или за углом большого дома, даже если мы человека не можем видеть.

Возвратимся опять от оптики к механике и постараемся полностью использовать аналогию между ними. Старой механике в оптике соответствует мысленное оперирование с изолированными, независимыми друг от друга световыми лучами. Новой волновой механике соответствует волновая теория света. Переходя от старого к новому представлению, мы выиграем в возможности учитывать явление диффракции или, лучше сказать, нечто весьма аналогичное явлению диффракции света; эти явления в механике, как и в оптике, вообще говоря, не должны играть особой роли; в противном случае старое представление механики не могло бы столь долгое время нас удовлетворять. Но не трудно догадаться, что в известных случаях явление диффракции, которым пренебрегали, должно быть весьма заметным, целиком управляющим механическим процессом и представляющим для старой теории неразрешимую трудность; это будет иметь место тогда, когда вся механическая система по своим размерам сравнима с длиной «материальных волн», играющих для механических процессов ту же роль, какую световые волны для процессов оптических.

Диффракция является причиной того, почему в этих крошечных системах атомов старое представление оказалось непригодным; оно остается применимым с большей точностью к грубым механическим процессам, но уже не в тонкой игре в областях порядка одной или немногих длин волн. Чрезвычайной неожиданностью было открытие, что здесь при новом волновом представлении сами собой исчезают все те странные добавочные требования, которые были насильно втиснуты в старую теорию, чтобы приспособить последнюю к описанию атома и суметь как-нибудь понять его реальное поведение.

Мы видим, существенным пунктом является то обстоятельство, что размеры атома и длины волн, гипотетических волн материи, — величины примерно одного порядка. Вы, конечно, спросите, чистая ли случайность, что при нашем исследовании строения материи мы как раз в этом месте сталкиваемся с величиной порядка длины волны. Вы спросите затем, откуда вообще

известно об этих длинах волн материи, представляющих совершенно новый инструмент теории, никогда и нигде прежде не наблюдавшийся. Может быть, мы просто должны сделать это предположение?

Конечно, это совпадение размеров отнюдь не является простым случаем, и нам не нужно делать никакого нового предположения. Размеры длин волн получаются сами собой из теории, и величина их приводит к следующему замечательному факту. Опыты Резерфорда и Чедвика над рассеянием альфа-лучей, можно сказать, доказали, что тяжелое ядро атома значительно меньше самого атома и может поэтому рассматриваться в дальнейшем как точечный центр притяжения. Вместо электронов мы вводим гипотетические волны, оставляя длину волн пока что совершенно неопределенной, ибо мы о ней ничего не знаем. Тогда в наших вычислениях будет стоять некоторая буква, например a , обозначающая какое-то еще не известное число. К этому мы уже привыкли, и ничто не мешает нам вычислить, что атомное ядро должно вызывать дифракцию этих волн, аналогично небольшой пылинке в случае света. Так же, как там, мы получим, что размеры области возмущения, окружающей ядро, тесно связаны с величиной длины волны и будут одного порядка с последней.

Теперь мы должны проделать решающий шаг: мы отождествляем область возмущения, или арену дифракции, с атомом; мы утверждаем, что атом в действительности является не чем иным, как дифракционным явлением электронных волн, так сказать, пойманных атомным ядром. Тот факт, что величина атома и длина волны будут одного порядка, не является уже больше случайностью, но представляется очевидным. Однако мы не знаем еще значений ни той, ни другой величины, так как в наших расчетах все еще стоит одна неопределенная постоянная, которую мы обозначили a . У нас имеются две возможности, взаимно контролирующие друг друга, для определения этой неизвестной. Во-первых, мы можем выбрать ее так, чтобы внешние проявления атома и, прежде всего, испускаемые им спектральные линии, как известно, измеренные весьма точно, получались бы в количественном согласии с опытом. Во-вторых, можно выбрать неизвестную величину так, чтобы арена дифракции оказалась совпадающей с размерами атома. Оба этих определения (из которых второе, впрочем, будет гораздо менее точным ввиду неясности понятия «величина атома») вполне согласуются друг с другом. Мы можем, наконец, заметить, что неопределенная постоянная физически имеет на самом деле размерность не длины, но величины действия, т. е. энергии, умноженной на время. В таком случае весьма естественно взять для нее значение универсальной постоянной кванта действия Планка, хорошо известное из законов теплового излучения. Оказывается, что при всей возможной в настоящее время точности мы возвращаемся к первому (наиболее точному) определению.

Таким образом, теория обходится минимумом новых предположений. В ней содержится единственная произвольная постоянная, которой мы должны придать численное значение, хорошо известное из старой квантовой теории; таким путем мы получаем, во-первых, правильную величину дифракционной площадки, которую мы можем разумным образом отождествить с ато-

мом, и можем, во-вторых, количественно правильно вычислить все проявления атома — испущенный им свет, работу ионизации и т. д.

Я попытался здесь развить перед вами основную идею волновой теории материи в возможно более простой форме. Разрешите мне сознаться теперь, что, стремясь достичь возможной простоты, я несколько приукрасил положение вещей. Это не относится к полноте, с которой были подтверждены экспериментом все достаточно осторожно сделанные выводы теории; но речь идет о принципиальной легкости и простоте, с которой все эти следствия были получены. Я не имею здесь в виду трудности математические, всегда в конце концов тривиальные, но именно трудности в основных принципах. Конечно,

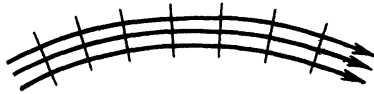


Рис. 8

легко заявить, что мы должны перейти от представления траектории к системе волновых поверхностей, перпендикулярных к ней. Но эти волновые поверхности, даже если мы будем рассматривать их небольшой участок (рис. 8), охватывают все же некоторый узкий пучок возможных траекторий и находятся со всеми ими в одинаковом соотношении. Согласно старому представлению, одна из этих траекторий выделяется в каждом конкретном случае как «действительная» из всех остальных «просто возможных». В новой теории дело обстоит иначе. Мы сталкиваемся здесь со всей глубиной логической противоположности между случаем: «или — или» (механика точки) и случаем «и — и» (волновая механика).

Дело не обстояло бы так плохо, если бы мы должны были отставить старую теорию и заменить ее новой. К сожалению, речь идет не об этом. С точки зрения волновой механики бесконечное множество возможных траекторий точки является чем-то фиктивным, ни одна из них не имеет преимущества быть реально осуществленной в каком-либо конкретном случае, но, как я уже упоминал выше, мы во многих опытах действительно наблюдаем пути отдельных частиц. Волновое представление может это объяснить только с большим трудом или вообще не в состоянии дать на это ответ. Нам дьявольски трудно объявить эти следы траекторий, которые мы видим, только узкими пучками равноправных возможных путей, которые связаны друг с другом волновыми поверхностями. Однако эти связи необходимы, чтобы понять явление дифракции и интерференции, которые можно наглядно продемонстрировать на той же частице с такой же отчетливостью, а не только заключить о них на основании теоретических представлений об атоме, о чем была речь выше. Хотя дело и обстоит таким образом, что мы в каждом конкретном частном случае можем ответить на вопрос, не впадая в противоречие с какой-либо из двух точек зрения, но мы не можем более оперировать с такими приятными и как будто необходимыми понятиями, как «действительный» или «только

возможный»; никогда нельзя сказать, что в действительности имеет место или в действительности происходит, но лишь указать, что будет наблюдаться в данном частном случае. Должны ли мы навсегда удовлетвориться подобным положением вещей? Принципиально, конечно, да. Принципиальное требование, что наука в конце концов должна стремиться к описанию действительно наблюдаемого, вовсе не является новым. Вопросом является лишь, должны ли мы будем отныне отказаться связывать это описание с какой-либо ясной гипотезой о том, как в действительности устроен мир. Многие хотят уже сегодня заявить об этом отказе. Но мне кажется, что тем самым мы несколько уклоняемся от трудностей.

Я охарактеризовал бы современное состояние наших знаний следующим образом. Луч или траектория частицы отвечает продольной связи процесса распространения (т. е. в направлении распространения), волновая же поверхность соответствует поперечной связи, т. е. перпендикулярно направлению. Оба способа связи, без сомнения, являются реальными: один доказывался фотографиями Вильсона, другой — интерференционными опытами. Охватить их единой картиной нам до сих пор еще не удалось. Только в крайних случаях перевешивает поперечная, слоистая, или же, наоборот, лучевая, продольная, связь настолько, что мы надеемся обойтись при помощи одной волновой или одной корпускулярной картины.

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ КВАНТОМЕХАНИЧЕСКИХ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ И СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ¹

§ 1. Планковский осциллятор

Привлекательная черта метода, который описывается здесь, заключается в том, что этот метод позволяет избежать громоздких преобразований, обращения за помощью к специально разработанным сложным математическим средствам или разложения в степенные ряды. Он дает все собственные функции линейчатого спектра посредством одной вполне элементарной квадратуры. Источником этого метода является хорошо известный способ изучения осциллятора. Его амплитудное уравнение

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - x^2\psi + \lambda\psi = 0 \quad (1.1)$$

(λ — собственное значение) может быть записано одним из следующих двух способов:

$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad & \left(\frac{d}{dx} - x\right)\left(\frac{d}{dx} + x\right)\psi + (\lambda - 1)\psi = 0, \\ \text{(II)} \quad & \left(\frac{d}{dx} + x\right)\left(\frac{d}{dx} - x\right)\psi + (\lambda + 1)\psi = 0. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Если подействовать на одно из этих уравнений вторым из двух дифференциальных операторов первого порядка, которые входят в это уравнение, то для функции, получающейся из ψ применением к ней этого оператора, получается уравнение второго порядка, но с $\lambda+2$ или $\lambda-2$ соответственно вместо λ . Таким образом, оба оператора переводят некоторую собственную функцию, принадлежащую λ — если только они не аннулируют ее — в некоторую собственную функцию, относящуюся к собственным значениям $\lambda+2$ или $\lambda-2$ соответственно. Они не приводят к нарушению непрерывности и не разрушают квадратичную интегрируемость, как это можно показать умножением (I) и (II) на ψdx , интегрированием от $-\infty$ до $+\infty$ и последующим применением однократного интегрирования по частям.

Для начала легко найти решение для $\lambda=1$ из (I):

$$\left(\frac{d}{dx} + x\right)\psi = 0, \quad \text{т. е. } \psi = e^{-\frac{x^2}{2}}. \quad (1.3)$$

Можно показать, что все собственные функции получаются из этой одной повторным применением другого оператора, а именно $\frac{d}{dx} - x$. Таким обра-

¹ E. Schrödinger. Proc. Roy. Irish. Acad., 1940, A45, 9. Перевод В. П. Визгина.

зом, получаются ряды собственных значений $\lambda=1, 3, 5, 7, \dots$. Общий метод состоит в разложении более сложных операторов второго порядка, которые встречаются в других задачах, на два взаимно сопряженных линейных оператора первого порядка. Взаимная сопряженность обеспечивает сохранение квадратичной интегрируемости, которую мы в дальнейшем будем считать само собой разумеющейся.

§ 2. Нерелятивистский атом водорода (кеплеровское движение)

После выделения из решения сферических гармоник $P_l(\theta, \phi)$, соответствующих некоторым целым l , и введения удобных единиц уравнение для радиальной переменной x будет выглядеть следующим образом:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2}{x} \frac{d\psi}{dx} - \frac{l(l+1)}{x^2} \psi + \left(\lambda + \frac{2}{x}\right) \psi = 0; \quad (2.1)$$

x — радиус-вектор r в единицах радиуса первой боровской орбиты; λ — энергия E в ридберговских единицах энергии; таким образом

$$x = \frac{4\pi^2 m e^2}{h^2} r, \quad \lambda = \frac{h^2}{2\pi^2 m e^4} E. \quad (2.2)$$

Собираясь исследовать отрицательные собственные значения, положим

$$\lambda = -\frac{1}{a^2}, \quad (2.3)$$

при этом принимаем за a положительное значение $(-\lambda)^{-1/2}$.

Уравнение (2.1), умноженное на x^2 , может быть переписано в одной из следующих двух форм:

$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad & \left(x \frac{d}{dx} + a - \frac{x}{a}\right) \left(x \frac{d}{dx} - a + 1 + \frac{x}{a}\right) \psi + [(a-1)a - l(l+1)] \psi = 0, \\ \text{(II)} \quad & \left(x \frac{d}{dx} - a + \frac{x}{a}\right) \left(x \frac{d}{dx} + a + 1 - \frac{x}{a}\right) \psi + [a(a+1) - l(l+1)] \psi = 0. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Они еще недостаточно удобны, потому что не связаны между собой таким образом, чтобы одна из них переводилась в другую обращением порядка операторов и приданием a другого значения.

Положим

$$\psi(x) = f\left(\frac{x}{a}\right), \quad \frac{x}{a} = y. \quad (2.5)$$

Это особое преобразование, потому что оно применяется только к собственным функциям, ведь a означает всегда обратный квадратный корень из собственного значения ψ , взятого с противоположным знаком. Мы будем

иногда позволять себе называть f собственной функцией, хотя это — некоторое сокращение, с которым следует обращаться осторожно. Для f мы получим

$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad & \left(y \frac{d}{dy} + a - y\right) \left(y \frac{d}{dy} - a + 1 + y\right) f + [(a-1)a - l(l+1)] f = 0; \\ \text{(II)} \quad & \left(y \frac{d}{dy} - a + y\right) \left(y \frac{d}{dy} + a + 1 - y\right) f + [a(a+1) - l(l+1)] f = 0. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Теперь, если вы знаете некоторую собственную функцию f , относящуюся к a (т. е. к собственному значению $\lambda = -1/a^2$), подставьте ее в (II) и примените к уравнению оператор $y \frac{d}{dy} + a + 1 - y$. Тогда вы получите для

$$f^{(1)} = \left(y \frac{d}{dy} + a + 1 - y\right) f \quad (2.7)$$

уравнение типа (I) только с $a+1$ вместо a . Следовательно, $f^{(1)}$, если только она не исчезает тождественно, является собственной функцией, которая относится к $a+1$, т. е. к собственному значению $\lambda = -\frac{1}{(a+1)^2}$.

Меняя роли (I) и (II), вы найдете, что

$$f^{(2)} = \left(y \frac{d}{dy} - a + 1 + y\right) f, \quad (2.8)$$

если только она не исчезает — это собственная функция, которая относится к $a-1$, т. е. к собственному значению $\lambda = -\frac{1}{(a-1)^2}$.

Решение, с которого следует начать, легко получается из (I), если положить $a = l+1$, т. е. $\lambda = -\frac{1}{(l+1)^2}$, и

$$\left(y \frac{d}{dy} - l + y\right) f = 0,$$

которое дает

$$f = y^l e^{-y}. \quad (2.9)$$

Исходя из этой собственной функции, вы можете «действовать повышающим образом» посредством процесса (2.7) и получить собственные функции, относящиеся к $a = l+2, l+3, l+4, l+5, l+6, \dots$ до бесконечности. Действительно, некоторая функция, которая аннулировалась бы на очередном этапе, никогда уже не смогла бы быть повышена.

Возвращаясь от этих f к собственным функциям согласно (2.5) и поступая точно так же для каждого значения $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$, вы действительно исчерпаете все собственные функции хорошо известного линейчатого спектра. Таким образом, целесообразность метода несомненна, и мы могли бы на этом

закончить. Но нам хотелось бы более строго доказать исчерпываемость множества собственных функций.

Двигаясь от любой данной собственной функции $f(y)$ «вверх» посредством (2. 7) и «вниз» посредством (2. 8) повторно и в произвольном порядке, вы будете двигаться по одной и той же «лестнице» собственных значений — до тех пор, пока не остановитесь на нулевом результате. Истинная сущность (2. 6) состоит в том, что оба оператора, о которых идет речь, если их применить в любом порядке к некоторой собственной функции, оказываются взаимно обратными, с точностью до постоянного множителя. Более того, если «лестница» заканчивается внизу (т. е. если процесс (2. 8) ведет к нулю), то рассмотрение (2. 6) (I) покажет вам, что предшествующая неисчезающая функция должна совпадать с функцией (2. 9), и, таким образом, лестница родственна той, которая была найдена нами. Если мы сможем доказать, что лестница, исходящая из любой собственной функции, должна остановиться где-то внизу, то никаких других лестниц быть не может.

Умножая теперь (2. 1) на $x^2\psi dx$ и интегрируя от $x=0$ до $x=\infty$, вы получите интегрированием по частям

$$-\int_0^{\infty} \left(x \frac{d\psi}{dx}\right)^2 dx + \int_0^{\infty} [\lambda x^2 - 2x - l(l+1)] \psi^2 dx = 0. \quad (2.10)$$

Мы исследуем случай отрицательных λ . При этом второй интеграл должен иметь отрицательное значение, которого не может быть, если не выполняется

$$(-\lambda) l(l+1) < 1. \quad (2.11)$$

Теперь, если бы «понижающий» процесс не остановился, мы могли бы (начиная с некоторого решения, о котором кто-нибудь мог бы сказать, что оно ускользает от нас) действовать понижающим образом до тех пор, пока не получили бы a такое, что

$$0 < a \leq 1 \quad (2.12)$$

и, таким образом, некоторое собственное значение, для которого вследствие (2. 3)

$$-\lambda \geq 1. \quad (2.13)$$

Это противоречит (2. 11), за исключением случая $l=0$.

Следовательно, понижающий процесс, помимо этого случая, должен остановиться раньше, лестница должна закончиться внизу, и, значит, это наша лестница. Чтобы учесть случай $l=0$, обратимся к интегрированию формы (2. 4) (I) уравнения (2. 1) и вспомним, что оба оператора взаимно сопряжены.

Мы не будем иметь дело с неотрицательными λ . По своему существу наш метод непригоден для континуума. Чтобы охватить и этот случай, следует превратить соответствующий сплошной спектр в густо заполненный линей-

чатый спектр посредством небольшого изменения задачи. Это сделано в § 4 и, вероятно, представляет собой наиболее интересный аспект рассматриваемой здесь проблемы.

§ 3. Обобщенные сферические гармоники

Сферическая гармоника на трехмерной гиперсфере является произведением обычной сферической гармоники $P_l(\theta, \psi)$ и функции $S(\chi)$, зависящей от третьего угла χ , который изменяется, подобно θ , от 0 до π и соответствует, в известном смысле, расстоянию до начала координат (радиус-вектор r , деленный на радиус кривизны). Для $S(\chi)$ справедливо следующее уравнение*:

$$\frac{d}{d\chi} \left(\sin^2 \chi \frac{dS}{d\chi} \right) - l(l+1)S + \lambda \sin^2 \chi S = 0, \quad (3.1)$$

l — порядок обычной сферической гармоники и, таким образом, некоторое заданное неотрицательное число. Известно, что λ равно $n(n+2)$, где n — целое число, равное или большее, чем l . Но для нас это собственное значение, которое должно быть определено. Умножая (3.1) на $S d\chi$ и интегрируя от $\chi=0$ до $\chi=\pi$, мы заключаем, что

$$\lambda \geq l(l+1) \quad (3.2)$$

и, таким образом, конечно, неотрицательное. (Аргументация в основном такая же, как та, которая позволила получить (2.11) из (2.10)).

Разложение оператора в (3.1) получается, если положить

$$a = \sqrt{l+1}, \quad \lambda = (a-1)(a+1).$$

Эквивалентные формы записи (3.1) таковы:

$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad & \left(\sin \chi \frac{d}{d\chi} + a \cos \chi \right) \left(\sin \chi \frac{d}{d\chi} - (a-1) \cos \chi \right) S + \\ & + ((a-1)a - l(l+1)) S = 0, \\ \text{(II)} \quad & \left(\sin \chi \frac{d}{d\chi} - a \cos \chi \right) \left(\sin \chi \frac{d}{d\chi} + (a+1) \cos \chi \right) S + \\ & + (a(a+1) - l(l+1)) S = 0. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Отсюда можно увидеть, в точности тем же образом, как в предыдущих случаях, что два линейных оператора «повышают» или «опускают» значение a соответственно, определяя таким образом, — если они не приводят к нулю, — некоторую собственную функцию, которая относится к $a(a+2)$ или к $(a-2)a$ соответственно. Мы получим некоторую исходную собственную

* E. Schrödinger. Commentationes Pontif. Acad., 1938, 2, 321, уравнение (2.13).

функцию из (I), принимая

$$a = l + 1 \quad (3.4)$$

и решая уравнение

$$\left(\sin \chi \frac{d}{d\chi} - l \cos \chi \right) S = 0,$$

что дает

$$S = \sin^l \chi. \quad (3.5)$$

Исходя из этой функции, мы «действуем повышающим образом» повторным применением оператора

$$\sin \chi \frac{d}{d\chi} + (a + 1) \cos \chi, \quad (3.6)$$

в котором, конечно, a следует увеличивать шаг за шагом соответственно собственному значению собственной функции, на которую мы действуем оператором. Первый применяемый оператор

$$\sin \chi \frac{d}{d\chi} + (l + 2) \cos \chi,$$

второй —

$$\sin \chi \frac{d}{d\chi} + (l + 3) \cos \chi$$

и так далее.

Этот «повышающий» процесс никогда не прекращается и дает лестницу собственных функций, относящихся к собственным значениям

$$l(l + 2), (l + 1)(l + 3), (l + 2)(l + 4), \dots \quad (3.7)$$

То, что эта процедура единственна, можно убедительно показать следующим рассуждением.

Движение по лестнице «вниз», начиная от любой собственной функции, могло бы в том случае, если бы не закончилось, привести к

$$\lambda = (a - 1)(a + 1), \quad 0 \leq a < 1, \quad (3.8)$$

которое отрицательно в противоречии с (3.2). Следовательно, лестница должна закончиться и (вследствие (3.3) (I)) должна прерваться на нашей функции (3.5) и, следовательно, должна совпадать с нашей лестницей.

§ 4. Кеплеровское движение на гиперсфере

Насколько я знаю, это — новая задача, которую, по-моему, трудно решить каким-либо другим путем. Может показаться безрассудным принимать во внимание ничтожную кривизну Вселенной, имея дело с атомом водорода, потому что влияние даже таких значительно более сильных гравитационных

полей, при наличии которых в действительности происходят все наши наблюдения (если система отсчета должным образом выбрана), пренебрежимо мало. Но эта задача, вследствие возможности стирания в ее рамках резкой границы между «эллиптическими и гиперболическими орбитами» (классические орбиты здесь все замкнуты) и представления непрерывного спектра посредством густо заполненного линейчатого спектра, имеет весьма интересные черты, допускающие исследование рассмотренным выше методом, который оказывается здесь едва ли более сложным, чем в плоском случае.

Правильная форма кулоновского потенциала (отвечающая $1/r$ для плоского пространства) соответствует, как известно, $\cot \chi$. После расщепления сферической гармоник порядка l мы получим следующее уравнение для той части волновой функции, которая зависит от χ — будем продолжать называть ее $S(\chi)$, как в предыдущем параграфе:

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m R^2} \left[-\frac{1}{\sin^2 \chi} \frac{d}{d\chi} \left(\sin^2 \chi \frac{dS}{d\chi} \right) + \frac{l(l+1)}{\sin^2 \chi} S \right] - \frac{e^2}{R} \cot \chi S - ES = 0, \quad (4.1)$$

где R — радиус постоянной кривизны.

Положим

$$\frac{8\pi^2 m R^2 E}{\hbar^2} = \lambda, \quad \frac{4\pi^2 m e^2 R}{\hbar^2} = \mu. \quad (4.2)$$

Следовательно,

$$\frac{d}{d\chi} \left(\sin^2 \chi \frac{dS}{d\chi} \right) + (\lambda \sin^2 \chi + 2\mu \sin \chi \cos \chi - l(l+1)) S = 0, \quad (4.3)$$

где μ — данная постоянная, а λ — собственное значение, подлежащее определению. Разложение (4.3) следующее:

$$\begin{aligned} \text{(I)} \quad & \left(\sin \chi \frac{d}{d\chi} + a \cos \chi - b \sin \chi \right) \left(\sin \chi \frac{d}{d\chi} - (a-1) \cos \chi + \right. \\ & \left. + b \sin \chi \right) S + [(a-1)a - l(l+1)] S = 0, \\ \text{(II)} \quad & \left(\sin \chi \frac{d}{d\chi} - a \cos \chi + b \sin \chi \right) \left(\sin \chi \frac{d}{d\chi} + (a+1) \cos \chi - \right. \\ & \left. - b \sin \chi \right) S + [a(a+1) - l(l+1)] S = 0, \end{aligned} \quad (4.4)$$

при условии, что

$$\lambda = (a-1)(a+1) - b^2, \quad \mu = ab. \quad (4.5)$$

Чтобы удовлетворить этому требованию, мы примем за a положительный квадратный корень из

$$a^2 = \frac{\lambda+1}{2} + \sqrt{\left(\frac{1+\lambda}{2}\right)^2 + \mu^2} \quad (4.6)$$

и за b

$$b = \frac{\mu}{a}.$$

Собственные функции, которые мы ищем, зависят от λ как от своего рода параметра или индекса, но, конечно, от значения, соответствующего μ . Удобно считать их функциями a и b . Нетрудно представить a и b посредством λ и μ с помощью (4. 6). Но мы не будем этого делать до тех пор, пока будем использовать ее для получения других собственных функций.

Следуя образцу, описанному уже дважды, нетрудно усмотреть, что второй оператор в (II) переводит некоторую собственную функцию, принадлежащую (a, b) , в функцию, относящуюся к $(a - 1, b)$. Решение, с которого следует начать, дается посредством

$$\left(\sin \chi \frac{d}{d\chi} - (a - 1) \cos \chi + b \sin \chi \right) S = 0 \quad \text{с} \quad a = l + 1$$

и, таким образом,

$$S = \sin^l \chi \cdot e^{-b\chi}. \quad (4. 7)$$

Применяя второй оператор

$$\sin \chi \frac{d}{d\chi} + (a + 1) \cos \chi - b \sin \chi$$

повторно к этой собственной функции, подставляя при этом (в оператор) первый раз $a = l + 1$, затем $a = l + 2$, $a = l + 3$ и т. д., получим последующие собственные решения. С учетом (4. 7) они связываются с $a = l + 1, l + 2, l + 3, \dots, (l + k)$ и т. д. до бесконечности, но все с одним и тем же b .

В согласии с (4. 6)

$$b = \frac{\mu}{l + k}, \quad (4.8)$$

в то время как в соответствии с (4. 5) наши функции относятся к собственным значениям

$$\lambda = (l + k - 1)(l + k + 1) - \frac{\mu^2}{(l + k)^2} \quad (k = 1, 2, 3, 4, \dots). \quad (4. 9)$$

Исчерпываемость вычислительной процедуры может быть показана тем же самым способом, как в § 2 и § 3.

Из (4. 9) и (4. 2), положив $l + k = n$ ($= 1, 2, 3, \dots$), получаем следующие значения термов в обычных единицах:

$$E_n = B \left(-\frac{1}{n^2} + (n - 1)(n + 1) \frac{a_1^2}{R^2} \right), \quad (4. 10)$$

B — постоянная Ридберга, a_1 — радиус первой боровской орбиты и R — радиус кривизны Вселенной.

Граница между «связанными» и «собственными» состояниями не достаточно резкая. Она будет таковой примерно при $n = 10^{18}$. Густота расположения боровских уровней в верхнем пределе постепенно переходит в густоту,

представляющую континуум. Она, конечно, чрезвычайно велика. В наиболее густо заполненной области находится примерно 10^{38} уровней на 1 гц.

В том, что оба хорошо известных спектра — спектр кеплеровского движения и спектр гиперсферы — складываются, чтобы образовать спектр кеплеровского движения на гиперсфере, состоит удивительно простое решение вопроса. Если заряд постепенно стремится к нулю, то уровни энергии постепенно передвигаются от отрицательных к положительным и заканчиваются на спектре невозмущенной гиперсферы. Существует, таким образом, непрерывный переход между спектром, соответствующим атому водорода, и спектром гиперсферы без точечного заряда. Иначе обстоит дело в плоском пространстве. Там бесконечный ряд дискретных уровней сгущается все более и более около точки $E=0$ до тех пор, пока они, так сказать, не поглощаются этой точкой.

Описанный здесь общий метод можно было бы назвать методом сопряженных операторов первого порядка. Я думаю, он дает наиболее непосредственное понимание, доступное в настоящее время, того, как линейчатый спектр зависит от структуры уравнения.

Доложено 11 декабря 1939 г.

КАНОНИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИХ АМПЛИТУД¹

Определение статистической энтропии термодинамической системы всегда основывается на подсчете числа перестановок при тех или иных определенных ограничениях. На физическом языке это означает подсчет числа различных микросостояний, которые неразличимы для макроскопического наблюдателя — одинаковы с точки зрения макроскопических свойств, единственно доступных для такого наблюдателя. Среди таких свойств главную роль обычно играет полная энергия системы. Для подсчета упомянутых состояний обычно применяемый метод обосновывается предположением о том, что каждая система — будь она большая и мы реально экспериментируем с ней, или она — одна из огромного множества микросистем, на которые мы подразделяем большую систему, — всегда находится в состоянии сколь угодно точно определенной энергии, т. е. находится на одном из своих «квантовых энергетических уровней», если данная система подчиняется законам квантовой механики. Нас интересует рассмотрение именно этого случая.

Предположение о вполне определенных энергетических уровнях нельзя, однако, примирить с самими основами квантовой механики. Такое предположение все же принимают, ибо оно привычно, весьма удобно и дает в сущности тот же результат, что и последовательная точка зрения на энергию как на величину, которая почти всегда является не вполне определенной, испытывает некоторый разброс, относительно малый в случае большой системы, но зачастую большой для малых систем.

Здесь будет показано, что для одиночной системы в условиях тепловой бани разброс энергии очень близок к статистической флуктуации во времени, вычисляемой из упрощенных не слишком обоснованных соображений.

В связи с этим мне хотелось бы изложить обобщенное доказательство того, что последовательная точка зрения приводит к тому же термодинамическому результату, что и куций, но удобный метод «развешивания» одиночных микросистем по своим собственным точно заданным энергетическим уровням. Такое доказательство очень важно. Ибо можно придерживаться любого мнения о том догмате всякого ортодоксального квантового теоретика, что мы реально и *физически* «вешаем» объект на один из этих энергетических уровней, когда измеряем энергию объекта. Но догмат этот едва ли оправдывает даже *мысленную* процедуру такого рода для бесчисленных микросистем, энергию которых мы не только не измеряем, но даже и не думаем о возможности подобного измерения. В буквальном смысле подобный догматический подход означал бы, что физический процесс состоит из цепи «припадков

¹ Впервые опубликовано как приложение ко 2-му изд. книги «Статистическая термодинамика» (Кембридж, 1952) (*E. Schrödinger. Statistical Thermodynamics. Cambridge University Press, 1957, p. 89—95*). Перевод В. А. Белокопя.

и судорог» — последовательных передач порций энергии между микросистемами, даже без каких-либо помех со стороны наблюдающего «субъекта». Подобная точка зрения, если ее рассмотреть всерьез, может сойти разве что за метафору, иногда удобную.

Состояние объекта мы будем ассоциировать с волновой функцией. Тем самым мы приписываем объекту «чистое состояние» — в противоположность «смешанному состоянию», математическим эквивалентом которого является матрица плотности. Слишком строгие теоретики могут оспаривать такое использование волновой функции, не определяемой экспериментально. Но тогда они должны были бы перестать совершенно пользоваться волновыми функциями, поскольку ни одна волновая функция не определяется экспериментально.

Здесь я не вижу никаких возражений против использования волновой функции в указанном смысле и считаю такой подход достаточно общим для выяснения нашего главного пункта — того, что числа перестановок и статистическая энтропия, вычисляемая по этим числам, — все эти величины следуют непосредственно из самой схемы собственных значений энергии. Тогда становится ясным, что привычная, но незаконная процедура изучения возможных распределений ансамбля по дозволенным уровням (и аналогичные методики) просто не нужна.

Для этого мы должны начать все сначала. Отождествление статистических концепций нашей модели с термодинамическими концепциями для физического объекта не может обойтись без некоторых фундаментальных предположений.

Квантовомеханические энергетические уровни большой (по лабораторной шкале) системы сильно вырождены. Пусть мультиплетность собственного значения E_r энергии составляет m_r . Предположим, что энтропия большой системы с энергией E_r равна

$$S = k \ln m_r, \quad (1)$$

где k — постоянная Больцмана. Такое определение находится, разумеется, в полном соответствии с тем, чем мы обычно пользуемся, поскольку m_r это, очевидно, «число различных способов, которыми энергия E_r может быть размещена в системе». Однако в данном изложении мы должны называть именно это утверждение основным, фундаментальным предположением № 1. Предположение № 2 будет более рискованным: оно принимает на себя всю ответственность — в данном контексте — за извечную загадку «молекулярного беспорядка». Речь идет о том, что мы предполагаем следующее: в большой системе при определенных обстоятельствах (при малых неконтролируемых непрекращающихся возмущениях — см. ниже) квадраты квантовомеханических амплитуд или «интенсивности возбуждения» в среднем по времени одинаковы для каждой из m_r собственных функций, принадлежащих одному и тому же собственному значению E_r . Достаточно, чтобы это предположение имело силу только в весьма широком понимании, а именно: что за длительную историю системы не обнаружится никакого предпочтения для какой-либо собственной функции из этого, как правило бесконечного, множества выро-

женных функций. Более того, квантовомеханические уравнения движения таковы, что справедливость предположения № 2 не нарушается с течением времени, т. е. «условие хаотизованности» в квантовой механике является инвариантным. В частном случае задачи об электронных уровнях в электрическом поле это условие приводит к корректным результатам при вычислении интенсивностей спектральных компонент при штарк-эффекте, когда мультиплетность уровней мала и условия возмущения представляются более контролируемыми, чем при термодинамическом рассмотрении.

Теперь, кроме системы с собственными значениями энергии E_r с мультиплетностью m_r , нам предстоит рассмотреть вторую систему — с собственными значениями энергии F_s с мультиплетностью p_s . Мы складываем обе системы, но сперва только мысленно, рассматривая их как одну «комбинированную» систему.

Общее для двух составляющих собственное значение энергии

$$E_r + F_s \quad (2)$$

обладает по меньшей мере мультиплетностью $m_r p_s$, поскольку любая из m_r собственных функций энергии E_r (назовем ее пока ψ), если ее умножить на любую из p_s собственных функций энергии F_s (скажем, Φ), даст собственную функцию собственного значения энергии $E_r + F_s$ комбинированной системы

Более того, при любом состоянии комбинированной системы интенсивность возмущения, т. е. квадрат абсолютной величины любой амплитуды вида $\Phi\psi$, складывается с квадратом амплитуды собственного значения E_r первой системы и, разумеется, с квадратом амплитуды значения F_s второй системы.

Далее мы продолжим следующим образом:

1) разрешаем любой контакт между двумя системами при том лишь ограничении, что описание состояния этих систем может остаться таким же, как и до контакта, т. е. системы описываются так же, как если бы контакта не было. Такое приближение допустимо и нередко в квантовой механике используется;

2) пусть комбинированная система пребывает в своем энергетическом состоянии

$$E = E_r + F_s; \quad (3)$$

3) вторая система считается столь обширной (тепловой баней!), что для любого значения E_r найдется энергетическое состояние «бани» F_s , удовлетворяющее (3) при данном фиксированном значении полной энергии двух систем E , мультиплетность которой составляет, таким образом,

$$\sum_r m_r p_s \quad (4)$$

— сумму по всем r , где s удовлетворяет соотношению (3). Строго говоря, значение E_r следует ограничить сверху*, но в предельном случае очень большой тепловой бани это ограничение становится ненужным.

* Для выполнения условия $E_r \ll E$, см. ниже. — Прим. перев.

Для комбинированной системы из предположения № 2 следует, что квадраты ее амплитуд собственных волновых функций, характеризующихся собственными значениями энергии первой системы $E_1, E_2, \dots, E_r, \dots$, относятся друг к другу, соответственно, как

$$m_1 p_s, m_2 p_s, \dots, m_r p_s, \dots, \quad (5)$$

где обозначения, надеюсь, недвусмысленны.

Следовательно, эти произведения с таким же успехом выражают отдельно для первой системы относительные величины квадратов ее амплитуд с различными E_r ; более того, в согласии с нашим предположением № 1 имеем

$$k \ln p_s = S(F_s) = S(E - E_r), \quad (6)$$

где S — энтропия тепловой бани как функция энергии ее. Поскольку энергию рассматриваемой системы E_r можно считать малой по сравнению с энергией комбинированной системы E , то достаточно ограничиться таким приближением:

$$k \ln p_s = S(E) - \frac{\partial S(E)}{\partial E} E_r = S(E) - E_r/T, \quad (7)$$

где T — температура.

Следовательно,

$$m_r p_s = m_r \{ \exp - (E_r/kT) \} \cdot \{ \exp (S(E)/k) \}. \quad (8)$$

Множитель в первых фигурных скобках зависит от индекса r и поэтому может быть опущен, поскольку мы интересуемся только отношениями величин. Абсолютные величины — это вопрос нормировки, а сумма всех квадратов абсолютных величин амплитуд отдельно для первой системы обычно при этом нормируется на единицу.

Таким образом, в тепловой бане, задающей температуру для нашей рассматриваемой системы (с энергией E_r , которая может быть и большой и малой), мы получили точно такое же каноническое распределение квадратов амплитуд, как и при обычной трактовке вероятностей пребывания системы на том или ином энергетическом уровне. И в самом деле, тот, кто остается верен ортодоксальным догмам квантовой механики, может найти лишь незначительную разницу между этими двумя утверждениями, поскольку для него квадраты амплитуды имеют точный смысл нахождения данной системы на данном интересующем нас (энергетическом) уровне, если он измеряет энергию системы; если же ортодокс измерением энергии не занимается, то он вам ответит, что вопрос этот просто его не касается.

Я не могу согласиться с таким отношением к обсуждаемой проблеме. Ибо при теоретическом анализе конкретного эксперимента мы должны, как правило, рассматривать довольно много физических данных, которые не подлежали измерению во время проводимого и анализируемого эксперимента.

Чтобы проиллюстрировать уменьшение числа основных предположений, достигаемое при нашем методе рассуждений, предположим, что системой

(с E_r) является электромагнитная радиация в полости, образованной толстыми стенками, обеспечивающими однородную температуру. В таком случае планковская формула черного излучения может быть выведена просто методом приписывания каждому «излучательному осциллятору» (т. е. классической собственной частоте полости) хорошо известных равноотстоящих энергетических уровней квантового осциллятора и рассмотрения уровней всего «излучательного тела» как аддитивно составленных из всевозможных комбинаций осцилляторных уровней. Я бы сказал так: просто эта структура из уровней является необходимой и имеет непосредственное отношение к рассматриваемой задаче

Нет никакой необходимости в более категорическом предположении, которое обычно делается, а именно, что каждый индивидуальный излучающий осциллятор всегда вмещает в себя целое число квантов $h\nu$, или, как иногда говорят, что в любом состоянии, отмечаемом у данного индивидуального излучающего осциллятора, всегда имеется целое число фотонов данного специфического сорта. Концепция фотонов как «порций лучистой энергии», понимаемая вне рамок фундаментальной идеи о структуре спектра собственных значений, становится необязательной, почти делом вкуса, во всяком случае для задачи построения статистической термодинамики.

В нашем выводе канонического распределения (8) имеется некоторая непоследовательность: комбинированная система «тепловая баня + рассматриваемая система» предполагалась с определенной энергией E . Наш вывод в этом отношении следовал старому образчику — начинать с «микрканонического распределения» для большой системы и получать каноническое распределение для малой ее подсистемы, свободно контактирующей (обменом энергии) с остальной частью большой системы. Я не думаю, что эта традиционная непоследовательность очень серьезна. Вполне очевидно, что почти любое умеренно острое (например, то же каноническое) распределение комбинированной системы приводит к тому же результату.

Вся термодинамика данной системы может быть выведена из канонического распределения (8) квантовомеханических амплитуд. Для включения в теорию «внешней работы» следует допустить, что уровни E_r зависят от наблюдаемых параметров (таких, как объем; с макроскопической точки зрения эти параметры должны удовлетворять требованию, что система не совершает механической работы, если эти параметры остаются постоянными).

Теперь мне хотелось бы показать, что наше основное предположение (1) для больших систем может быть апостериори если не оправдано, то, по меньшей мере, согласовано с тем, что следует из (8). Для этого запишем среднее значение энергии системы

$$\langle E \rangle_r = \frac{\sum E_r m_r \exp(-E_r/kT)}{\sum m_r \exp(-E_r/kT)} = kT^2 \frac{d \ln Z^*}{dT}, \quad (9)$$

где

$$Z = \sum m_r \exp(-E_r/kT) \quad (10)$$

* Внешние параметры предполагаются неизменными. — Прим. перев.

называется «статистической суммой». Таким образом,

$$\langle E \rangle_r dT = kT^2 d \ln Z$$

или

$$-d\left(\frac{\langle E \rangle_r}{T}\right) + \frac{d\langle E \rangle_r}{T} = k d \ln Z,$$

а в итоге

$$d\langle E \rangle_r = T d\left(\frac{\langle E \rangle_r}{T} + k \ln Z\right). \quad (11)$$

Поэтому энтропию рассматриваемого объекта логично приравнять следующему выражению:

$$S = \frac{\langle E \rangle_r}{T} + k \ln Z = k \frac{d}{dT} (T \ln Z). \quad (12)$$

Если система достаточно велика, то статистическую сумму можно заменить ее максимальным членом, т. е. среднюю энергию — ее наиболее вероятным значением E_r . Тогда из (10) и (12) получаем

$$S = k \ln m_r, \quad (13)$$

где индекс r относится к упомянутому максимуму. Это совпадает с (1). Можно рассуждать и по-иному

Максимальный член статистической суммы (10) при фиксированной температуре может быть определен приравниванием нулю производной от общего члена по r , т. е. из уравнения

$$d \ln m_r - \frac{1}{kT} dE_r = 0$$

или

$$dE_r = T d(k \ln m_r). \quad (14)$$

С точки зрения термодинамики этот результат вполне согласуется с (13), и это согласие имеет глубокий смысл. Ибо соотношение (14) между двумя приращениями в окрестности главного члена суммы сохраняет силу для любой заданной температуры

Следовательно, это же соотношение должно иметь силу и для реальных приращений, когда максимум распределения сдвигается из-за изменений температуры.

МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ ВОПРОСЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

2400 ЛЕТ КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ¹

1. Левкипп из Милета

«Разве современная атомистическая теория — не просто двойник теории Левкиппа и Демокрита? Она происходит из нее, она — плоть из ее плоти»*. Внутреннее объективное и внешнее историческое обоснования этого тезиса в полной мере сохраняют свою силу и сегодня. Объективное обоснование даже усилилось с тех пор, как подтвердилось мнение Левкиппа о том, что все составные части атомов одинаковы; при этом безразлично, представляют ли себе все химические атомы состоящими из нуклонов и электронов или элементарные частицы сами состоят «из энергии» и в принципе могут превращаться друг в друга путем аннигиляции или образования пар.

Левкипп теперь считается почти ровесником Сократа**. По наиболее надежным источникам твердо установлено, что к нему, как основоположнику***, действительно восходят все руководящие идеи атомистики. Его ученик Демокрит, бывший примерно на десять лет моложе, привлек внимание как своих современников, так и последующих поколений значительно больше. Владея более широкими знаниями, обладая действительно универсальным образованием и несравненно более широким кругозором, Демокрит не только продвинул учение своего наставника, но довел это учение до всеохватывающего представления о мире. Основные черты этой теории, хотя и несколько расплывчато, выявляются в сохранившихся извлечениях из его многочисленных сочинений, к сожалению, безвозвратно утерянных, а также в различных других источниках.

Указанный в заглавии промежуток времени имеет в виду появление «Флоруита» Левкиппа, которое относят к 430 г. до н. э. или несколько раньше.

¹ *E. Schrödinger. Ann. Physik, 1948, 3, 43. См. также в кн.: Э. Шредингер. Новые пути в физике. М., «Наука», 1971, с. 107—115. Перевод А. М. Френка.*

* *Th. Gomperz. Griechische Denker. V. 1. 3 Aufl. Leipzig, 1912, S. 265.*

** *J. Burnet. Early Greek Philosophy. 4 Aufl. London, 1930, S. 330; C. Bailey. The Greek Atomists and Epicurus. Oxford, 1928, p. 64.*

*** Мнимый предшественник, философ-финикиец Мохус считается легендарным. Заимствование у индийских атомистов представляется невероятным, ибо сомнительно, чтобы оно вообще было возможно.

Чтобы оправдать такой подход, достаточно вспомнить, что выдвинутое впервые Планком в 1900 г. представление о квантовой структуре энергии содержит в себе в качестве специального случая атомистику обычной материи. К такому выводу приводит открытая в 1905 г. А. Эйнштейном эквивалентность массы и энергии. Благодаря этому закону эквивалентности мы почти вынуждены перенести квантованность структуры с обычной материи на все формы энергии. Подобное рассуждение дало бы естественный подход к квантовой теории, более естественный, чем использованный Планком. Это часто случается.

2. Макс Планк

Можно принять все это и все-таки задать себе вопрос: обещает ли современному физика какую-либо пользу подобное обращение к тем зачаткам нашей науки, которые в известном смысле были еще очень наивными? Ведь можно было бы считать исключительной глупостью, если бы по случаю чествования всеми уважаемого ученого кто-нибудь бы заявил, что его важнейшее открытие в сущности совсем не было новым. Но подобно тому, как колоссальная статуя может быть оценена, только если поставить ее на огромной площади, а не в комнате, так и исторически гениальное творение требует для рассмотрения тем более широкого временного интервала, чем оно значительнее. Наиболее выдающееся достижение Планка состоит в том, что он полностью сформулировал закон, часть которого была известна ранее. Эта часть ожидала своего продолжения в течение 24-х веков. Именно судьба этого «пробела» — вопроса о взаимодействии атомов — в свете открытия Планка заслуживает того, чтобы ее еще раз продумали с самого начала, потому что достигнутое до сих пор в этом вопросе нельзя считать окончательным. Другой пункт, на котором я хочу остановиться, — это проблема детерминизма, этическое содержание которого так мучительно трудно воспринимается. Часто забывают, что оба вопроса так же стары, как сама атомистика; может быть, в этом состояла причина, почему уклонялись от нее древние, которым в общем этика была ближе к сердцу, чем физика. Сегодня положение такое же, как тогда. Самое замечательное заключается в том, что попытки более поздних атомистов древности справиться с трудностями внешне поразительно напоминают квантовую механику.

3. Взаимодействие у древних атомистов

К основным понятиям атомной теории относится, кроме понятия об атомах, и их взаимодействие. Если атомы совершенно не действуют друг на друга, а пронизываются, подобно максвелловским волновым пучкам или световым квантам, то трудно себе представить, чтобы так возникающие явления наложения или интерференции отображали упорядоченный ход мировых событий того рода, которые мы наблюдаем распространяющимися в пространстве, часто с весьма запутанными причинно-следственными связями. Как мыслили себе взаимодействие в античной атомистике? Единственным свойством, приписываемым атомам, была их геометрическая форма. Она считалась аб-

солютно жесткой и неизменной, различные атомы отличались только формой, а не материалом, которым заполнялась внутренность этой геометрической фигуры. Заполнение предполагалось плотным, сплошным, однородным и неизменным. Идея заключалась в том, что внутрь атомов нельзя проникнуть; это того же рода непроницаемость материи, которая до сегодняшнего дня, как некая окаменелость, еще фигурирует в элементарных книгах. Если два атома встречаются так, что при невозмущенном продолжении обоих движений геометрическому условию непроницаемости грозит опасность, то явление требует некоторого компромисса, т. е. изменения обоих движений; старинная игра в мяч давала достаточно примеров для грубого представления об этом.

Форма этого компромисса, без сомнения, мысленно связывалась с инертностью, во всяком случае некоторая тенденция косности чувствовалась. Такое допущение лежит и в основе совершенно наивного представления об устойчивости уже существующего движения атомов. В древности все это не было столь само собой разумеющимся, как это кажется нам. Для неживой материи состояние покоя считалось уместным и естественным; для любого движения требовалось указывать причину, по крайней мере на Земле, в полуденной половине мира. Для звезд естественным считалось аристотелевское равномерное круговое движение. Правда, Платону уже не представлялось само собой понятным, что звезды сами поддерживают свое движение; поэтому он, по аналогии с людьми и животными, считал их живыми существами, а значит, конечно, богами.

Итак, взаимодействие атомов понималось как чисто геометрическое условие, к которому присовокуплялась некоторая инертность или особая мощь движущегося. О силах не говорилось ничего. Открытие этого понятия со всеми его безнадежными неясностями было оставлено для более позднего времени. Древняя атомистика была настолько «свободной от сил», что даже падение, т. е. стремление вниз, не считалось изначальным свойством материи. Отделение массивных твердых частей нашего мира от воздуха и огня скорее считалось следствием мощного вихревого движения, втягивающего наиболее грубые, т. е. самые крупные, атомы к центру вихря и выталкивающего самые тонкие, легкие наружу примерно так, как воздушный вихрь собирает сухие листья, заматывая их к середине.

4. Появление понятия силы и его преодоление

Реформаторы атомистики периода Возрождения также вначале думали только о близкодействии при соприкосновении. Но по мере того, как новое приобретение — планомерный эксперимент — расширяло область известных факторов, становилось все труднее обходиться только этим. Из небесной механики понятие силы проникло во все разделы физики, в том числе в атомистику. В XIX в. сплошь и рядом атомы представляли себе как центры сил, и даже действие при соприкосновении мыслилось как вырожденный случай силового закона. Казалось, что физическая модель окончательно свелась в дуалистической паре понятий: сила и вещество. На них как-то перешла

часть той благоговейной важности, с которой схоластика толковала о субстанции и акциденции. Лишь немногие хорошо чувствовали неудовлетворенность все ещё окутанного тайной и носящего явный анимистический отпечаток понятия силы. Среди них — Густав Кирхгоф, Эрнст Мах и Генрих Герц. И если два первых удовлетворились достойным благодарности изменением терминологии, то последний создал свой известный маленький шедевр — герцевскую механику. Как и древние, он заменил силы геометрическими условиями, но в значительно более общем виде. Уже по своему внешнему виду — геодезические траектории в римановом пространстве и т. д., — но особенно по своему духу механика Герца является предшественницей релятивистской теории гравитации. Она и попытка ее обобщения, кажется, призваны оправдать надежду на полную геометризацию изменчивости материи. Но теперь это касается уже не образа материальных частиц, как в античной атомистике, а скорее свойств пространственно-временного континуума. Эта параллель не простая игра слов. Вспомним, что в эйнштейновской теории материя сама является просто свойством образа континуума — именно его кривизны, так что между геометрией частиц и геометрией континуума нет никакой разницы. Желанное обобщение, которое наряду с гравитацией геометризировало бы и остальные силовые поля, привело бы к тому, что оба основных понятия — атомы и их взаимодействие — вновь объединились бы, и злополучный дуализм силы и вещества был бы устранен.

5. Атомизация взаимодействия

Но эта программа объединения * еще ни в коей мере не осуществлена. Но в принципе дуализм уже пал благодаря эйнштейновскому закону эквивалентности и планковской квантовой теории, ибо сила была символом возможности передачи энергии и импульса от тела к телу, а теперь энергия-импульс уже неотличима от движущейся материи. Последняя, т. е. обычно и всегда так называемая, есть только особый случай; движущийся атом не обладает энергией-импульсом, нет, он есть определенная форма энергии-импульса. Уже нет никаких следов субстанции или акциденции — первое столь же субстанциально и столь же акцидентально, как и другое. Так обобщает вопрос принцип эквивалентности. Благодаря этому квантовые законы, установленные Планком первоначально для определенного вида энергии или, вернее, для определенного вида обмена энергией и импульсом — электромагнитного излучения, — чудовищно обобщены и содержат корпускулярную структуру обычной материи как частный случай. Теперь мы снова можем доверять порциям энергии, которые вначале представлялись нам несколько расплывчато; мы осмеливаемся мыслить себе их частицами, не более и не менее реальными, чем те частицы, между которыми они обеспечивают обмен

* Выражение «единая теория поля», которое чаще всего употребляется для обозначения этой многожеланной цели, относится к одновременному охвату гравитации, электромагнетизма и, возможно, еще другого. Нужно заметить, что здесь понятие «объединение» приобрело иной, более глубокий смысл.

энергией. При таком крайнем представлении в сущности остаются только частицы, взаимодействующие таким образом, что они разделяются и объединяются или, возможно, так даже лучше сказать, сплавляются и разрываются. Определенные законы сохранения при этом выполняются, но определенного критерия для установления того, является ли так возникающий комплекс простым или составным — подобно тому, как химик знает, что назвать элементом и что соединением, — не существует или, во всяком случае, существует не всегда.

И все же это лишь одна сторона вопроса. Иногда возникает впечатление, что вся картина частиц является просто грубым «гиломорфным»* облачением законов сохранения, которую нельзя принять слишком всерьез. Они дают лишь баланс в процессе, для пространственно-временного описания которого необходимо еще привлечь полевые представления в том виде, который они имели ко времени, когда в теории взаимодействия господствовало понятие силы. Это действительно во всех случаях как для частиц по Левкиппу, так и для планковских частиц, которые теперь вышли на один и тот же рубеж**. Оба фундаментальных понятия — частицы и их взаимодействие — при объединении оказали влияние друг на друга; если, с одной стороны, произошла атомизация взаимодействия, то, с другой стороны, частица стала полеподобным образованием. Известны трудности, с которыми встречается осмысливание дуализма «волновое поле — частица». Может быть, утешением послужит то обстоятельство, что они являются совершенно явным пережитком уже преодоленного нами дуализма «сила — материя». В нем наглядно проявляются различные черты противопоставленных друг другу понятий; он привел к тем различным картинам, объединение которых в одну доставляет сейчас трудности.

6. Закон природы и свобода

Значение абдеритской школы в истории духовной культуры меньше всего обусловлено деталями данной ею картины природы, которая была оригинальной и плодотворной лишь в физике и значительно уступала современным ей представлениям о космосе пифагорейцев. Величие греческой атомистики V в. состоит в том, что она довела до вполне ясного понимания фундаментальные идеи ионического мировоззрения VI в.: что мир является постигаемым механизмом, действие которого можно исследовать наблюдением и размышлением; что все происходящее в природе можно понять из нее самой без греческих учений о таинствах, не прибегая к сверхъестественным силам и не ссылаясь на вмешательство воли сверхчеловека. Эта мысль о закономерности в природе, лежащая в основе всей современной науки, должна ей [предшествовать, ибо

* Греческое «hyle» равноценно латинскому «materia»; это прилагательное следует понимать по аналогии с антропоморфным.

** Иногда трудно избавиться от впечатления, что при целочисленном спине на первый план выступает полевой характер, а при полуцелом — корпускулярный. Есть ли в этом доля правды?

лишь она придает нам смелость создавать науку. Одно из немногих сохранившихся изречений Левкиппа гласит: ничего не происходит случайно, и все идет закономерно и с неизбежностью. По сохранившимся отрывкам из сочинений Демокрита, все же более многочисленным, а также по изложениям его учения можно с уверенностью заключить*, что неизбежная необходимость всего происходящего, извечная каузальная предопределенность составляли обязательную аксиому его мировоззрения; он последовательно придерживался ее, хотя вряд ли обманывался относительно пугающих следствий из нее для этики.

Впервые мыслитель столкнулся с трудно преодолеваемой проблемой, которая с тех пор в различных вариантах преследует его, никогда не отпуская: как сочетать свободу воли, требуемую нравственной ответственностью, со строгими закономерностями природы? Кто вместе с нами разделяет мнение, что на этот вопрос не существует чисто естественнонаучного ответа, тот будет восхищаться Демокритом потому, что он не искал компромиссного решения, а бесстрашно придерживался строгого детерминизма объективного хода явлений в природе. Те, кто шли непосредственно по его следам, думали иначе. Как говорят, мысль о том, что на этом основании, т. е. ради спасения свободы воли, следует допускать небольшие, но беспрестанные нарушения абсолютной закономерности движения атомов, восходит еще к Эпикуру. Правда, в сохранившихся сочинениях Эпикура нет ни слова об этом**. Главным свидетелем здесь выступает Лукреций, которому можно доверять, что он не ввел это важное новшество от себя. Ведь он был так предан учению своего кумира, что даже не упомянул о прогрессе естествознания за последующие два столетия! Итак, от Лукреция мы узнаем, что атомы постоянно испытывают приступы очень маленьких, совершенно неопределенных в пространстве и времени, спонтанных отклонений от механически предопределенной траектории; и только это спасает животных и людей от неумолимой предопределенной судьбы и дает им способность совершать произвольные движения по их свободному выбору.

Внешнее сходство этих приступов, или отступлений, с той интерпретацией квантовой механики, которая в наше время пользуется наибольшей популярностью, заслуживает внимания. Существует параллель в новое время и для этических практических применений. Те, кто воспринимает это всерьез,

* *C. Bailey. Op. cit., p. 121 ff.*

** *C. Bailey. Op. cit., p. 316; C. Bailey. Epicurus. Oxford, 1926.* (Сохранившиеся тексты Эпикура, их английский перевод и комментарий.) Поразительно отсутствие какого-либо намека на вопрос в подробном обучающем письме, направленном Геродоту и охватывавшем основы физики Эпикура. В другой связи, правда, идея неумолимого предопределенного рока подчеркнута, хоть и в очень общих выражениях, отклоняется: это было бы еще хуже, чем произвол богов, ибо тогда еще сохраняется надежда, что молением и жертвой их можно будет умиловить. Мне кажется, что характеру Эпикура вполне соответствует такое, без долгих раздумий, отклонение детерминизма, как не подлежащего обсуждению, ибо он не знал, что с ним делать; лишь в более зрелом возрасте он придумал конкретную картину для обоснования этого, чтобы противостоять повторным возражениям, в которых не могло быть недостатка.

должен видеть в Эпикуре величайшего предшественника, глубокая проницательность которого достойна восхищения. Меня лично во всем этом деле больше всего поражает острота, с которой уже ранняя естественнонаучная мысль отодвигает вопрос о неумолимости каузального требования, так что с самого начала выплыла та угнетающая антиномия, которая привела Эпикура к приведенной выше наивно материалистической попытке ее решения. Но здесь не место глубже входить в вопрос об истинной природе этой антиномии *.

* Она кратко изложена в послесловии к моей книге «What is Life?» (1944). [См. рус. пер.: Что такое жизнь? М., ИЛ, 1947.] С другой стороны, я касаюсь ее в одном исследовании, которое в скором времени должно появиться в журнале «Acta Physica Austriaca» [Die Besondderheit des Weltbildes der Naturwissenschaft. — Akta Physica Austriaca, 1948, 1, 101—215.]

СУЩЕСТВУЮТ ЛИ КВАНТОВЫЕ СКАЧКИ?¹

«... У меня складывается убеждение, что только самые веские соображения могут побудить, если не заставить, расстаться с представлениями, впитанными с молоком матери и разделяемыми подавляющим большинством, и прийти к признанию чего-то иного, принятого весьма немногими и поносимого всеми «школами», — того, что действительно кажется грандиозным парадоксом».

Галилео Галилей. Диалог о двух главнейших системах мира. День второй.

1. Культурный фон

Физика, как наука, цель которой не только изобретение все новых и новых заманчивых экспериментов, но и получение рационального понимания результатов наблюдений, навлекает на себя, по моему убеждению, серьезную угрозу отрыва от своего собственного исторического фона. Новые течения мысли в последние пятьдесят лет, сами по себе великие, важнейшие и неизбежные, обычно переоцениваются в сравнении с интеллектуальными достижениями прошедшего столетия. Это обусловленное временной перспективой непропорциональное преуменьшение предыдущих достижений, от которых зависит вся наша нынешняя просвещенность, доходит до нелепости по мере дальнейшего углубления в прошлое. Наряду с таким неуважением к историческим узам существует и тенденция зыбывать, что все естественные науки связаны с общечеловеческой культурой и что научные открытия, даже кажущиеся в данный момент наиболее передовыми и доступными пониманию немногих избранных, все же бессмысленны вне своего культурного контекста. Та теоретическая наука, которая не признает, что ее построения, актуальнейшие и важнейшие, служат в итоге для включения в концепции, предназначенные для надежного усвоения образованной прослойкой общества и превращения в органическую часть общей картины мира; теоретическая наука, повторяю, представители которой внушают друг другу идеи на языке, в лучшем случае понятном лишь малой группе близких попутчиков, такая наука непременно оторвется от остальной человеческой культуры; в перспективе она обречена на бессилие и паралич, сколько бы ни продолжался и как бы упрямо ни поддерживался этот стиль для избранных, в пределах этих изолированных групп специалистов. Так и прежде случалось в аналогичных обстоятельствах. Об этом восхитительно пишет Бенджамин Фаррингтон в своей «Греческой науке» (т. 2, Лондон, 1949, с. 173):

«Вероятно, наиболее решающим поражением античного научного духа была утрата чувства истории. История является наиболее фундаментальной наукой, ибо не существует такого человеческого знания, которое не утрачивало бы свой научный характер, когда забыты условия, при которых это знание возникло, и вопросы, на которые оно ответило, и функции, ради выполнения которых оно было создано. Огромная часть мистицизма и предрас-

¹ *E. Schrödinger.* Brit. J. Philos. Sci., 1952, 3, 233. Перевод В. А. Белокопя.

судков образованных людей состоит из знания, которое пострадало как раз от утраты исторических корней».

Пренебрежение историческими связями, впрочем, скорее гордость своим умением думать по-новому, работать по-новому, поступать по-новому, явные попытки как бы отвязаться от задолженности перед своими предшественниками — все это несомненно является общепринятой тенденцией нашего времени. В области изящных искусств мощные направления развиваются в этом же духе, и мы являемся свидетелями таких результатов подобного развития, как модернизм в живописи, скульптуре, архитектуре, музыке и поэзии. Находятся многие, кто смотрит на все это как на новый могучий взлет, в то время как иные считают это вспышкой, которая вот-вот погаснет. Вряд ли уместно распространяться здесь далее на этот счет, а мои личные взгляды на эту тему вряд ли кого заинтересуют. Однако я все-таки позволю себе утверждать, что где бы упомянутая тенденция ни проникала в науку, ей следует оказывать противодействие. Существование определенной угрозы вторжения в науку такой тенденции вообще очевидно, поскольку наука не является каким-то изолированным отправлением человеческого духа, она произрастает на той же исторической почве, что и прочие отправления духа и разделяет с ними умонастроения своего века. Я убежден, однако, что невозможно найти столь вопиющего примера проявления упомянутой тенденции, какой представляет собою теоретическая физика нашего времени. Уверен, что здесь мы встречаемся с эволюцией, которая является точным повторением того, что случилось ныне, как я уже говорил, с изящными искусствами. Вот наиболее подходящий термин для обозначения этого исторического явления: «гонгоризм». Термин этот мы заимствуем из истории поэзии, где он связан с именем поэта Спаниарда Луиса де Гонгора (1561—1627), автора очень, между прочим, тонких поэтических произведений, особенно в раннем периоде творчества. Так вот, что касается его позднейших поэм, к которым и относится данный термин, то и эти вещи хорошо послушать и они все не лишены смысла. Однако вся острота его ума, все его искусство направлены на то, чтобы сделать поэмы эти как можно более трудными для того читателя, который попытался бы уяснить себе скрытый в них смысл; так что даже его соотечественникам из Кастилии для уверенного понимания замыслов автора приходится прибегать к обширным комментариям.

Не следует, я думаю, заявлять и то, что если в указанном отношении физика следует общей тенденции нашего времени, то мы, мол, не должны противиться. Хотя мы и являемся всецело продуктом исторического развития, все же именно мы — продолжатели этого развития: история отнюдь не тащит нас по предопределенному пути. От нас самих всецело зависит, перестанем ли мы рассуждать, станем ли действовать в соответствии с разумом, наступит ли закат или за этим кризисом последует взлет. Именно это внушал нам неустанно в последнее время Бертран Рассел — по отношению к гораздо более важным проблемам, нежели судьба теоретической физики¹.

¹ Речь идет о борьбе Бертрана Рассела за мир, против гонки ядерных вооружений, пропаганде (совместно с Эйнштейном) идеи создания всемирного правительства. — *Прим. перев.*

Однако именно теоретическая физика будет нас здесь интересовать.

Мой друг и научный коллега проф. Ханс Тирринг в своей книге «Номо Сарпиенс» (Вена, 1948), где он проводит весьма продуманную и достойную восхищения кампанию против войны и за всеобщий мир, мимоходом высказывает мнение, что в античное время все, не считая людей гениальных, представляли Землю в виде плоского диска. Проф. Евгений Вигнер в своей статье «О пределах науки»¹ колеблется, считать ли «годом рождения» химии 1780 (Лавуазье) или 1808 (закон Дальтона). Физика, говорит Вигнер, несколько старше, поскольку ньютоновские «Начала» стали известны в 1667 г. Он полагает, что некоторые «законы физики Архимед открыл примерно в 250 г. до н. э., однако его открытия едва ли стоит считать реальным началом физики». Не считая должным уделять место опровержению столь странных воззрений, отошлю читателя к двум превосходным книгам проф. Бенджамина Фаррингтона о греческой науке (изд-во «Pelikan»). И все-таки я бы отметил, что среди «несущественных» открытий древних ученых было доказательство, полученное (вероятно, Архимедом) на основе гелиоцентрической системы Аристарха, что неподвижные звезды должны быть удалены от нас по меньшей мере на два световых года (в современных единицах); отсюда ими делались дальнейшие заключения о том, что с таких расстояний Солнце должно было бы выглядеть слабой звездой и что, наоборот, многие из этих звезд должны быть размером с Солнце, а иные даже превосходить Солнце размерами, или яркостью, выражаясь по-современному. Разумеется, требуется некоторое время для того, чтобы научное знание было усвоено культурными слоями общества. Как повествует Чарлз Дарвин в своем произведении «Путешествие натуралиста», он в 1833 г. вызвал немалую сенсацию среди образованного аргентинского общества, сообщив этим деятелям, что Земля шарообразна, а ведь это было известно уже более 2300 лет.

Какое же отношение имеет все это к проблеме квантовых скачков? Предыдущими строками я старался вызвать такое умонастроение, которое заставило бы как следует задуматься, к какой именно части нынешних научных достижений будет проявлен интерес — не только историками — через 2000 лет?

Бывают самые остроумные построения, дающие в высшей степени точное описание наблюдаемых фактов, но тем не менее становящиеся неинтересными для всех, кроме профессиональных историков. Я имею в виду теорию эпициклов. Я придерживаюсь того еретического взгляда, что аналогичным случаем в современной теоретической физике является идея о квантовых скачках. Скачки эти, пожалуй, соответствуют кругам, циклам, которые описывают Солнце, Луна и звезды вокруг Земли за 24 часа, как стали думать тогда люди, осудившие более раннее, более лучшее знание. Об эпициклах различного порядка я напому, когда речь пойдет об иерархии виртуальных квантовых переходов. Но пусть эти бестактные замечания не обескураживают читателя. Мы приступаем к самой сути дела.

¹ См. сб.: Этюды о симметрии. М., «Мир», 1971, с. 171—172. «Самое замечательное в науке — ее молодость», — пишет Вигнер. — *Прим. перев.*

2. Дискретные состояния как собственные значения (моды)

Мы все говорим сейчас, что тот существенный шаг, который сделал в 1900 г. Макс Планк, в итоге послужил основой квантовой теории. Это было сделанное на уровне абстрактного мышления открытие разрывности там, где она меньше всего ожидалась, а именно — в процессе обмена энергией между элементарными материальными системами (атомами или молекулами), с одной стороны, и световым или тепловым излучением — с другой. Планк с самого начала весьма неохотно шел на то, чтобы сформулировать более дерзкое заключение о том, что каждому атому или молекуле приходится выбирать только среди дискретного набора «состояний»; что такая частица как атом или молекула нормально может удерживать в себе лишь определенное дискретное «резко очерченное» количество энергии, являющееся характеристикой природы этой частицы; иными словами, что эта элементарная система нормально должна находиться, выражаясь по-современному, на одном из этих «энергетических уровней», исключая те обстоятельства, при которых система перепрыгивает более или менее внезапно с одного уровня на другой, либо излучая свою излишнюю энергию в окружающую среду, либо поглощая требуемую энергию извне, смотря по тому, какой случай представится. Планк испытывал даже еще большие колебания по следующему поводу: принимать или не принимать ту точку зрения, что само по себе излучение подразделено на отдельные порции, или световые кванты — «фотоны» (по современной терминологии). При всем при том имелись достаточные основания для таких колебаний.

Все же, спустя лишь совсем немного лет, в 1905 г. Эйнштейн выдвинул гипотезу об этих световых квантах, подкрепив ее неотразимой аргументацией, а в 1913 г. Нильс Бор, всерьез восприняв эти дискретные состояния атомов и с величайшим остроумием обобщив предположения Планка в двух направлениях, со своей неопровержимой логикой смог объяснить количественно некоторые из атомных линейчатых спектров, каждый из которых явно дискретен и которые в своей полной совокупности представляют собою колоссальную головоломку. Бору удалось при этом превратить эти объяснения в окончательное и бесспорное очевидное доказательство того, что дискретные состояния являются глубоким и вполне реальным фактом.

Примерно лет двенадцать боровская теория держалась твердо, отмеченная неоднократно столь поразительными и глубочайшими успехами, что нам можно вполне простить себе то, что мы закрывали глаза на один весьма внушительный дефект этой теории: претендуя на точное описание так называемых «стационарных» состояний, в которых атом пребывает нормально, т. е. в сравнительно неинтересные промежутки времени, когда ничего не случается, эта же самая теория хранила полнейшее молчание о переходных периодах, т. е. о самих «квантовых скачках» (как их уже тогда начали называть). Поскольку же промежуточные состояния для данной теории — тема запрещенная, то не остается ничего иного, как считать переход мгновенным; однако, с другой стороны, излучение когерентного цуга волн длиной метр-

полтора, который вполне наблюдаем при помощи интерферометра, подразумевает, что на это понадобится соответствующий средний интервал времени, приходящийся как раз между двумя состояниями, причем в этом промежутке атому не остается никакого времени для «пребывания» в этих стационарных состояниях — тех единственных, которые теория только и может описывать.

Указанная трудность преодолевается квантовой механикой, в частности волновой механикой, представляющей новое описание самих состояний; как раз это описание отсутствовало в самом раннем варианте новой теории, который предшествовал примерно на год волновой механике. Признанные уже скачки (разрывы непрерывности) при этом не были отброшены, но они были куда-то убраны из самого понятия состояний. Это легче всего постигнуть из аналогии с вибрирующей струной, барабанной перепонкой, мембраной или звучащим колокольчиком. Если по такому телу нанести удар, оно завибрирует; иными словами, оно немного деформируется, а затем сразу же начинает подвергаться непрерывному множеству все новых и новых малых деформаций. Имеется бесконечное множество способов нанесения удара по деформируемому телу, скажем по колокольчику: инструментом жестким или мягким, острым или тупым, по различным местам или одновременно по нескольким точкам. Эти способы представляют собой бесконечные вариации начальных деформаций и соответственно истинную бесконечность форм последующих колебаний: быстрая «последовательность кинокадров», так сказать, которая описывает следующую за данной начальной деформацией вибрацию, представляет собой бесконечное многообразие. Но в каждом случае, сколь усложненным ни было бы реальное движение, его можно математически проанализировать, представив в виде суперпозиции дискретных наборов сравнительно простых колебаний, каждое из которых происходит на вполне определенной «собственной частоте». Эти дискретные наборы частот зависят и от формы, и от материала тела — его плотности — и иных свойств. Они могут быть вычислены из теории упругости, из которой следует с легкостью и общностью само существование таких наборов частот и дискретность собственных мод (решений) и этих собственных частот, а также сам факт, что любое возможное колебание тела можно разложить на суперпозицию этих мод — для упругого тела какой угодно формы.

Достижением волновой механики явилось нахождение общей наглядной картины-модели, в которой «стационарные» состояния теории Бора играли роль собственных колебаний, а боровские дискретные «энергетические уровни» — роль собственных частот; и все это следует из новой теории, поскольку она принята физиками, так просто и так складно, как в теории упругости, на которую мы уже ссылались в порядке аналогии. Более того, согласно этой модели излучаемые частоты, наблюдаемые в линейчатых спектрах, равны разностям частот собственных. Это становится легко понятным в том случае, когда две эти частоты проявляются одновременно — при простых предположениях о природе колеблющегося «нечто».

3. Постулированный энергетический баланс или явление резонанса

Но вот что, как мне всегда казалось, имеет наибольшее отношение к данной проблеме. Речь пойдет о таком пункте, который здесь хотелось бы особо подчеркнуть и о котором почти стерлись всякие воспоминания — если только слова вообще что-то значат и если определенные слова, ныне общеупотребительные, еще можно понимать буквально.

Принцип суперпозиции не только ликвидирует разрывы между «стационарными» состояниями и позволяет нам, нет, более того, принуждает нас допускать промежуточные состояния, не устраняя дискретности «энергетических уровней» (поскольку их роль играют собственные частоты); этот же принцип полностью ликвидирует прерогативу стационарных состояний. Сам эпитет «стационарное» становится устаревшим. Каждый, кто бы ни познакомился с квантовой (волновой) механикой, не зная предшествовавшей теории Планка—Эйнштейна—Бора, не будет склонен думать, что квантовая система в каждый данный момент времени отдает предпочтение лишь одной из собственных мод. И все же именно такое «предпочтение» подразумевается при текущем использовании слов «энергетические уровни», «переходы», «вероятности переходов».

Упорное постоянство такого стиля мышления понятно, ибо громадные и остроумнейшие достижения, основанные на идее порций энергии, должны были сделать свое дело и превратить в укоренившуюся привычку точку зрения на произведение планковской постоянной и частоты как на «порцию» энергии, теряемой одной системой и приобретаемой другой.

Но как же еще следует понимать этот точный «подгон» в великой «двойной бухгалтерии» Природы? Я утверждаю, что во всех случаях это можно понимать как явление резонанса. Следовало бы, по крайней мере, попытаться рассматривать атомные частоты именно как частоты, отбросив пресловутую идею о порциях энергии. Я обращаю внимание на то, что слово «энергия» используется ныне в двух совершенно различных смыслах: в макроскопическом и в микроскопическом. Макроскопическая энергия — это «количественная концепция». Микроскопическая же энергия — это «качественная концепция» или «концепция интенсивности»; вполне уместно было бы говорить об энергии высшего класса и энергии низшего класса — в соответствии со значением частоты ν . Правда, как это ни странно, величина макроскопической энергии получается суммированием, с соответствующими весами, по упомянутым частотам, и здесь использование константы h дает правильный результат. Однако это еще отнюдь не означает с необходимостью, что в каждом отдельном случае микроскопического взаимодействия происходит обмен целой порцией $h\nu$ макроскопической энергии.

Я уверен в допустимости рассмотрения микроскопического взаимодействия как явления непрерывного — без утраты при этом и весьма ценных результатов Планка и Эйнштейна о макроскопическом равновесном распределении энергии между излучением и веществом, и любых других достижений теории, основанной на «порциях энергии», в понимании явлений.

Одного лишь следует придерживаться — того, что представляет собою неотъемлемое следствие волнового уравнения, в какой бы форме оно ни использовалось для решения той или иной задачи, а именно: что взаимодействие между двумя микроскопическими физическими системами контролируется специфическими законами резонанса.

Эти законы требуют, чтобы разность двух собственных частот одной системы равнялась разности двух собственных частот другой системы:

$$\nu_1 - \nu'_1 = \nu'_2 - \nu_2. \quad (1)$$

Такое взаимодействие описывается, соответственно, как постепенное изменение амплитуд рассматриваемых четырех собственных колебаний. Уже вошло в привычку умножать обе части этого равенства на h и утверждать, что первая система падает с энергетического уровня $h\nu_1$ на уровень $h\nu'_1$, причем энергия, равная разнице уровней, передается второй системе, позволяя ей повысить свою энергию от $h\nu_2$ до $h\nu'_2$.

Эта привычная интерпретация устарела. Ничто не заставляет ее придерживаться, но она служит помехой пониманию того, что происходит в действительности. Приверженцы этой интерпретации упрямо отказываются по-настоящему осознать принцип суперпозиции, который дает нам возможность предусматривать одновременные постепенные изменения любой в отдельности и всех вместе амплитуд, не избегая и существенных разрывов, если таковые имеются, например разрывного изменения значений частоты. Следует уточнить, что условие резонанса (1) может учитывать три взаимодействующие системы и более многочисленную группу систем. Условие это может, например, приобретать вид

$$\nu_1 - \nu'_1 = \nu'_2 - \nu_2 + \nu'_3 - \nu_3. \quad (2)$$

Более того, можно принять, что две или большее число взаимодействующих систем рассматриваются как одна система; это дает повод переписать (1) и (2) в следующем виде:

$$\nu_1 + \nu_2 = \nu'_1 + \nu'_2, \quad (1')$$

$$\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 = \nu'_1 + \nu'_2 + \nu'_3, \quad (2')$$

т. е. условие резонанса формулируется так: в процессе взаимодействия участвующие колебания должны быть составляющими одной и той же частоты. Это не ново. Незнакомым является молчаливое допущение, что частоты аддитивны, когда две или большее число систем рассматриваются как формирующие единую систему. Это допущение представляет собой неизбежное следствие волновой механики. Так ли уж противоречит оно нашему здравому смыслу? Если я выкуриваю 25 сигарет в день, моя жена — 10, а дочь — 12, разве не расходует вся наша семья в день 47 штук — в среднем?

4. Типичный эксперимент

Но шутки в сторону. Я хочу рассмотреть некоторые характерные эксперименты, которые якобы вынуждают нас стать на точку зрения признания существования упоминавшихся выше порций энергии. Я намерен показать, что эта вынужденность иллюзорна.

Рассмотрим пучок катодных лучей, скорость частиц (электронов) в котором однородна и может быть постепенно увеличена. Этот пучок пропускается сквозь пары натрия. После сосуда с парами натрия этот пучок, допустим, пересекает электрическое поле, которое отклоняет частицы пучка, позволяя нам судить об их скоростях. Одновременно спектрометр контролирует свечение, если таковое имеется, испускаемое парами натрия. При малой начальной скорости регистрировать нечего: нет ни свечения, ни изменений скорости частиц пучка. Однако, когда первоначальная скорость превышает некоторый резко обозначенный предел, случаются две вещи: пары натрия начинают светиться, излучая на частоте первой линии «главной серии»; сам же пучок катодных лучей, выходящий из паров, расщепляется отклоняющим электрическим полем на два пучка, в одном из которых первоначальные скорости остаются неизменными, а в другом — соответствуют «потере некоторого количества энергии», равного произведению частоты названной спектральной линии на планковскую константу h . Если скорость возрастет еще, то история повторится — когда энергия падающего катодного луча превысит «энергетический уровень», ответственный за вторую линию спектра (речь идет скорее о «разности уровней»); с появлением этой линии спектра возникает третий пучок катодных лучей с соответственно уменьшенной скоростью и т. д. Результаты этого опыта были восприняты и все еще воспринимаются как вопиющее свидетельство в пользу существования «порций энергии».

Правда, профессор Майкл Поланьи обратил мое внимание на то, что приведенное здесь описание эксперимента Франка—Герца страдает, мягко выражаясь, переупрощением.

Реальный пучок катодных лучей испытывает существенное рассеяние в парах, и поэтому возникающие две (или более) электронные частоты едва ли могли бы быть разделены простым использованием поперечного поля. Однако любые две электронные частоты могут быть разделены потенциальным барьером, который способны преодолеть электроны одной частоты, а электроны другой (меньшей) частоты поворачивают обратно, полностью отражаются. Поскольку и такая постановка опыта вполне объяснима при помощи волн де Бройля, излагаемые мною аргументы остаются неуязвимыми.

Итак, дело в том, что эксперимент Франка—Герца легко понять не только с позиций «порций энергии», но и исходя из точки зрения «явления резонанса». Ведь катодный луч при однородной скорости его частиц представляет собой монохроматический пучок волн де Бройля. И только когда частота ν_1 этих волн превосходит разность частот $\nu'_2 - \nu_2$ между самой низкой ν_2 и второй ν'_2 из собственных частот атома натрия, тогда имеется такая дебройлевская частота $\nu'_1 > 0$, которая удовлетворяет условию резонанса (1).

В таком случае колебание ν'_1 проявляется в упомянутой волне де Бройля, а ν'_2 — среди тех атомов, которые начинают излучать с частотой $\nu'_2 - \nu_2$, поскольку максвелловский «электромагнитный вакуум» способен резонировать с чем угодно. Расщепление пучка катодных лучей, после их прохождения сквозь пары, отклоняющим электрическим полем также объясняется волнами де Бройля: электрическое поле обладает по отношению к этим волнам «показателем преломления», который зависит от их частоты (явление «дисперсии»), причем в направлении силовых линий поля имеется градиент, так что поле играет роль «неоднородной преломляющей среды». Да и любые иные события, такие, как передача какого либо «кванта энергии» $h(\nu'_2 - \nu_2)$ от атома натрия к другим молекулам газа «ударами второго рода», столь же легко понимаемы, как явления резонанса, если только уметь повсюду распознавать волновую картину, в том числе для всех частиц, принимающих участие в процессе.

К явлению резонанса могут быть сведены и многочисленные другие аналогичные случаи передачи порций энергии, например фотохимические процессы. Схема остается той же: вы можете либо взять уравнения, подобные (1) и (2), формирующие условия резонанса, либо умножать эти уравнения на h и думать, что они выражают энергетический баланс для каждого одиночного микроперехода. В предыдущем примере особый интерес представляет такой пункт: воздействие внешнего агента (электрического поля) позволяет разделять в пространстве две (или больше) частоты, возникающие в катодном луче из-за взаимодействий, поскольку они по-разному откликаются на воздействие этого агента, причем разница в их поведении вполне понятна с точки зрения волн де Бройля.

Таким образом, получается два, если не больше, пучка, каждый из которых однороден по дебройлевской частоте (т. е. по скорости частиц). Чрезвычайно ценно то, что бывают столь простые случаи, при которых разделение на «фазы» лишено какой-либо таинственности; такое разделение здесь является прямым следствием принципов, заложенных самими ранними работами Луи де Бройля о волнах материи. Я бы даже назвал это везеньем, ибо существует обширный диапазон явлений, в которых пространственное разделение пучков либо имеет место в естественных наблюдаемых условиях, либо может быть вызвано простыми экспериментальными средствами, но отнюдь не так легко поддается объяснению исходя из «первых принципов». Эта трудность может разочаровать, помешать воспринимать защищаемую здесь идею о постепенно меняющихся амплитудах, ибо разделение на различные фазы, которое производится буквально на наших глазах, кажется подтверждающим веру в то, что в каждом одиночном микроскопическом взаимодействии происходит скачкообразно-внезапный и полный переход.

5. Химия, фотохимия и фотоэлектрический эффект

Сошлюсь для начала на обширную область явлений — обычную химию. Две или несколько компонент, смешиваемых в растворе или в газовой фазе, начинают реагировать друг с другом — под влиянием света или другого

фактора. Та часть, которая прореагировала и образовала новое химическое соединение, может почти полностью отделиться от остальной среды и образовать новую фазу из-за того, например, что продукты химической реакции почти нерастворимы, либо (в случае исходной газовой смеси) потому, что они представляют собой жидкость или твердое тело с низким давлением паров при данной температуре. Почти любая химическая реакция может послужить примером, но позвольте мне рассмотреть медленную реакцию, чтобы было побольше времени для разговоров и размышлений. Если соответствующая смесь газообразного водорода H_2 и газообразного кислорода O_2 освещается ультрафиолетовым светом, то возникает следующая реакция:



По мере того как возрастает концентрация водяного пара H_2O , часть его выпадает в виде капель жидкости.

Реальный процесс не столь прост, как можно было бы подумать, глядя на уравнение баланса (3), а является цепной реакцией. Впрочем, нет никакой необходимости уделять внимание этому вопросу; мы намерены рассмотреть лишь начальное состояние и конечные продукты реакции. В волновой механике газовая смесь представлена некоторым колебанием данной комбинированной системы, но, кстати, она представлена не одиночным собственным колебанием (модой), поскольку как-никак имеется обширное многообразие мод: поступательных, вращательных и, разумеется, электронных. Газообразное соединение H_2O (в отличие от смеси $2H_2 + O_2$) представлено совершенно иным колебанием той же самой системы. Определенные моды, являющиеся составляющими колебания данной системы, вначале отсутствуют, затем все сильнее и сильнее звучат по мере развития химической реакции. Но имеется и следующая — третья группа колебаний, представляющих жидкую фазу H_2O ; колебания эти вырастают там, где им способствуют ядра конденсации (пылинки), приводя к наблюдаемому результату в виде капель воды. Достойно, конечно, сожаления то, что волновая механика не позволяет нам аналитически проследить этот наблюдаемый процесс, в то время как общепринятая ныне интерпретация предоставляет нам богатую информацию о множестве таких экспериментальных результатов, которые никто не только не получил, но даже никогда получить не смог бы (например, нам говорят о том, какова вероятность нахождения электрона в данной точке внутри данного атома водорода, если бы мы попытались его там обнаружить).

Однако нет никакого повода для подозрений, что разделение фаз фундаментально отличается от спектроскопического разложения пучка световых или катодных лучей на их монохроматические составляющие. Никаких опасений не должен вызывать тот факт, что само образование пространственных границ, разделяющих компактные области с различными химико-физическими свойствами, невозможно точно описать при помощи волнового уравнения Шредингера, но якобы поэтому такое явление необходимо должно быть описано образно — в виде великолепного зрелища отдельных молекул, заглатывающих и извергающих обратно целенькие порции энергии, разла-

гающихся и снова рекомбинирующих, формирующихся в итоге в одну или две молекулы нового типа.

Я полагаю, что последнее утверждение попросту ложно; оно не согласуется с нашим нынешним состоянием знания, дальнейший прогресс которого, по-моему, затруднится, если будут и впредь пониматься буквально эти слишком удобные наглядные описания, которые в таком ходу ныне. А ведь нас подстрекают понимать их буквально не только в учебниках и популярных опусах, но и самим языком высокоученых узкоспециализированных трактатов. При этом я отнюдь не отрицаю, что такая наглядность весьма полезна. Напротив, она является незаменимой, играя роль своего рода концептуальной «стенографии» — при химических исследованиях. Невозможно себе представить, как обойтись без ее использования в тех случаях, например, когда должен быть выяснен механизм какой-то сложной реакции, цепной реакции и т. п. И, разумеется, химическое уравнение как способ описания этих реакций никогда не будет отброшено, хотя оно и описывает явно одиночное микрособытие и в этом смысле является ложным.

Это как раз тот случай, когда пресловутое «как если бы» спасает положение. И это не первый случай такого рода за всю историю взаимоотношений между химией и физикой. Химики использовали черточку в качестве символа валентности при построении моделей сложных молекул. Символ этот представляет самые реальные факты наблюдения. Физики долгое время не могли представить какого-либо своего объяснения для механизма химической связи. Затем, одно за другим быстро последовали два объяснения: для гетерополярной связи (Коссель в 1916 г.) и для гомеополярной связи (Лондон и Гайтлер в 1926 г.). Для химиков эти открытия явились объяснением химической связи; в самом деле: эти теории устранили некоторые трудности, вызывавшиеся слишком наивными интерпретациями «черточек» валентности. Однако, разумеется, эти черточки были сохранены в качестве чрезвычайно удобных символов, наподобие стенографических. Их оставили, поскольку они были основаны на результатах тщательно продуманных наблюдений.

В качестве одной из простейших фотохимических реакций мы можем рассмотреть фотоэлектрический эффект, который послужил одной из главных причин, побудивших Эйнштейна в 1905 г. пустить в обращение гипотезу световых квантов.

Если металлическую пластинку облучить светом достаточно высокой частоты, то ее тут же начнут покидать электроны с энергией, соответствующей этой частоте. Не будет никакой задержки во времени, даже тогда, когда интенсивность падающего света столь слаба, что в соответствии с электронной теорией Лоренца, которая в те времена была наиболее популярна, электрону потребовалось бы полчаса на то, чтобы набрать такую скорость. Современники расценили это как убедительное доказательство внезапности передачи целого кванта энергии от света к электрону. И сегодня, боюсь, считается так же. По-моему, нынешняя ортодоксальная интерпретация сводится к следующему.

Падающий луч света вызывает в каждом из десятков тысяч электронов крайне малую вероятность в следующее мгновение перепрыгнуть в состоя-

ние более высокой трансляционной энергии; соответственно малая доля этих десятков тысяч так и поступают, выскакивая из металла, и именно поэтому данная игра начинается без промедленья.

Однако в соответствии с волновой интерпретацией, т. е. согласно общепринятым идеям де Бройля и автора этой статьи, падающая световая волна производит отклик в виде наблюдаемых цугов электронных волн повышенной частоты, выскакивающих из металла (наблюдать дебройлевскую частоту электронов то же самое, что наблюдать их скорость). Но если признавать нашу волновую интерпретацию, то зачем еще нужна та вероятностная схема? Разве не становится беспочвенной сама идея о мистических внезапных скачках одиночных электронов? Для чего нужны эти скачки? Без волн обойтись нельзя, и нам ничего не стоит доказать это. Достаточно лишь поместить пробирку с кристаллической пудрой на пути электронного потока и зафиксировать интерференционное изображение того типа, что впервые было получено Г. П. Томсоном (оно может оказаться не столь красивым, как томсоновское, но и оно послужит гарантией, что волны те же).

6. Процессы одиночного взаимодействия между микросистемами («столкновения»)

И кроме химии имеются области теоретических исследований, для которых упрощенная схема индивидуальных составных частей микросистем, расположенных на четко определенных энергетических уровнях, с резкими переходами между ними, обеспечивает весьма удобную «стенографическую запись», сокращенное описание. Почти любое термодинамическое рассмотрение значительно облегчается принятием этой схемы при дискуссиях и размышлениях; это если и приводит к какой-то разнице в результатах, то к очень небольшой. В этом таится определенная угроза. В неразрывном союзе речи и размышления предпочтение, как это ни парадоксально, отдается речи. Когда мы слышим одни и те же слова снова и снова, да еще приносимые с авторитетностью, то мы склонны забывать, что именно значили первоначально эти слова-сокращения, повторением которых нас понудили поверить в то, что они описывают некую реальность.

Если бы упрощенная схема четко определенных энергетических состояний и резких переходов между ними работала во всех случаях (чего на самом деле, я думаю, нет), то следовало бы постараться вписать эту схему в согласованную теорию. К настоящему времени ничего подобного такой теории не существует, и я не вижу ни перспективы для ее создания, ни даже каких-либо побуждений к этому — по изложенным только что соображениям. В настоящее время эта схема не обладает внутренней согласованностью, причем не только оттого, что мистерия квантовых переходов продолжает присутствовать в ней со времен своего первого появления в теориях Планка (1900 г.) и Бора (1913 г.), но и по иным соображениям, тесно связанным с этими первыми.

В применении к двум индивидуальным системам, которые взаимодействуют, не совсем ясно, что именно следует считать различными чистыми

энергетическими состояниями-уровнями, к которым должна применяться упомянутая выше схема. Выбор этих чистых энергетических уровней-состояний основывается на математических приемах. Обычная процедура при этом такова. Полная энергия (которая фигурирует в математическом аппарате в качестве «оператора» волнового уравнения) рассматривается как состоящая из трех аддитивных частей: две главные составные части объявляются принадлежащими одиночным системам и к тому же, соответственно, контролирующим их поведение, если они не взаимодействуют; о третьей части говорят, что она является их энергией (или «оператором») взаимодействия. Однако такое подразделение является довольно искусственным, во всяком случае — пока имеет место сам процесс взаимодействия. Указанное подразделение обусловлено главным образом требованием, чтобы «главные» составные части энергии были сравнительно простыми и легко допускающими аналитическое рассмотрение, а вся сложность задачи перекладывалась на член взаимодействия, который называют «возмущением» и с которым обращаются с помощью приближенных методов. Но даже если это и так, задача все равно в данной постановке почти никогда не поддается общему точному решению, или хотя бы приближенному; приходится довольствоваться нахождением решения, которое описывает лишь то, что происходит в некотором малом интервале времени. При этом ограничиваются вычислением лишь весьма малых изменений амплитуд за этот краткий интервал; темп этого изменения обычно называют вероятностью перехода. Этим названием выражается вера в то, что после прекращения взаимодействия и разделения двух систем каждая из них окажется опять в чистом состоянии четко определенной энергии. Сам по себе расчет не дает такого результата. Сам расчет говорит лишь о том, что в каждой из систем будет иметь место суперпозиция множества чистых энергетических состояний — при некоторой взаимозависимости между различными составляющими амплитудами одной системы и амплитудами другой системы. Однако этот результат предпочитают интерпретировать как означающий осуществление здесь полного обмена только между единственной парой собственных частот (мод), одной-единственной из многих, для которых выполняется условие резонанса.

Могут сказать, а почему бы и не принять такую интерпретацию, если она работает и если она внутренне согласована? Нет, по-моему, она не согласована. Вот аргументы в пользу моего мнения. Предположим, что каждая из двух систем находится в некотором чистом энергетическом состоянии — до начала взаимодействия, когда эти системы еще можно считать изолированными. Далее, допустим, что взаимодействие наступило, причем весьма слабое. Несомненно законной является та точка зрения, что теперь перед нами уже одна система; даже более того, такая позиция является фундаментально корректной; разбиение же волнового оператора («энергии») на две части, отдельно принадлежащие каждой из этих систем, плюс часть, описывающая само взаимодействие, это всего лишь математическое ухищрение. Как бы, однако, слабым ни было взаимодействие, непосредственным его следствием является весьма сильное отклонение совокупной (комбинирован-

ной) системы от любого из принадлежащих ей чистых энергетических состояний. Такое отклонение отнюдь не является результатом какого-то очень сильного взаимного влияния подсистем, оно получается еще прежде, чем произойдет какое-либо физическое изменение. Оно является результатом некоторого «расстройства» собственных мод под воздействием возмущения. Что нам ясно, так это то, что «однотонных» собственных мод изолированных (под) систем более не имеется, они совершенно отсутствуют — в комбинированной «расстроенной» системе от них ничего не осталось. Для нахождения собственных мод комбинированной системы вам придется перемещать эти «однотонные» моды и скомбинировать их (путем наложения, суперпозиции) мысленно весьма курьезным способом. Я говорю «скомбинировать мысленно», ибо здесь не существует, разумеется, никакого непосредственного физического перемешивания состояний; просто вы утверждаете, что ваша комбинированная система весьма далека от того, чтобы находиться в одной-единственной из своих собственных мод. Именно поэтому с течением времени может произойти все, что угодно, и поэтому, фактически, даже слабое взаимодействие, дайте срок, приведет к существенному изменению амплитуд. Ведь простым, элементарным и общепризнанным положением волновой механики является то, что изолированная система, которая колеблется в точном соответствии с одной из своих собственных мод, не подвергается вообще какому бы то ни было изменению.

Эти соображения имеют, между прочим, следствия, о которых стоит упомянуть. Когда мы только что говорили о слабом взаимодействии, наступающем между первоначально изолированными системами, читатель мог весьма естественно представить себе две системы, первоначально пребывавшие на огромном расстоянии, а затем сближающиеся и входящие в контакт. Я намеренно избегал такого образного описания, поскольку оно категорически противоречит предположению о том, что упомянутые изолированные системы пребывали в чистых энергетических состояниях. Нельзя говорить о взаимном сближении таких систем. Думать об атомах и молекулах, находящихся в чистых энергетических состояниях и при этом движущихся туда-сюда, сталкивающихся и отскакивающих, — это противоречит самым фундаментальным концепциям волновой теории. Там, где что-либо случается, там мы не встретим чистых энергетических состояний. Яснее не скажешь.

Давайте на минуту вернемся к нашим двум слабо взаимодействующим микросистемам или, как я предпочел бы выразиться, к системе, состоящей из двух частей при слабой связи между ними. Положение дел попросту заключается в том, что если данная система в целом успокоилась точно в одном из своих чистых энергетических состояний, то состояние это отнюдь не является таким состоянием, которое в общепринятой интерпретации считается означающим определенное распределение полной энергии между упомянутыми двумя частями — даже далеко не таким. Я имел в виду, что дело здесь сводится не к вопросу о слабой флуктуации или малой неопределенности упомянутого распределения энергии. Речь идет о множестве сильно различающихся вариантов распределения энергии. Если связь между подсистемами в этот момент убрать, то заново изолированные системы — части прежней

системы — завибрируют, каждая в отдельности, в режиме суперпозиции самых различных собственных мод.

Подытожим: общепринятые воззрения, отдающие предпочтение «резким энергетическим состояниям», внутренне противоречивы, по крайней мере в пределах того языка, который используется (а о том, что на самом деле якобы подразумевали люди, которые говорят нам, что они сказали не то, что хотели сказать, — судить трудно). Мы считаем эти воззрения внутренне противоречивыми в том смысле, что они неприменимы одновременно и к целому и к отдельным его частям; нам оставлено выбирать и применять то, что мы сами предпочтем, притом так, как мы сочтем для себя наиболее удобным. И даже не самое главное противоречие, которое мы там обнаружили, заключается в том как будто невинном утверждении, что две системы, каждая из которых имеет точно определенную энергию, сближаются и сталкиваются. Такое противоречие может показаться более привлекательным, если его попытаться обойти, договорившись: «... ну ладно, мы не имели в виду действительно совершенно точные значения энергии». Некоторые могут счесть наши возражения по данному пункту чуть ли не капризом, а интерпретацию — делом вкуса. Но я хотел бы знать, действительно ли они считают этот пункт не имеющим отношения к реальным задачам о столкновениях.

7. Снова о культурном фоне

Рассмотренный мною здесь случай могут счесть совершенно неуместным. Могут сказать, что упоминавшееся «предпочтение», отдаваемое точным энергетическим состояниям, не следует принимать всерьез и что я по своей наивности ценю их по номинальной стоимости. Мы ведь можем, продолжали бы мои оппоненты, пользоваться чистыми энергетическими состояниями любой системы — просто подобрав эти состояния так, чтобы они были удобны для применения аналитического аппарата. Любое состояние любой системы можно рассматривать как некоторую суперпозицию либо каких-то, либо всех ее собственных мод (=чистых энергетических состояний). Моды эти можно рассматривать и по отдельности, как если бы данная система пребывала в том или ином состоянии; из нескольких полученных таким образом результатов, должным образом суммированных, вы узнаете, что получается из суперпозиции этих мод, если действительно захотите узнать. Мой предполагаемый оппонент, возможно, даже сделает уступку, согласившись, что он просто пользуется для удобства чем-то вроде стенографии, вроде сокращенного описания, как это делается в химии и статистической термодинамике; однако он считал бы вполне позволительным применять такие рассуждения и для исследования одиночного события — взаимодействия между микросистемами.

На это у меня есть два ответа, относящиеся к двум весьма различным пунктам.

Первый заключается в следующем. Даже если бы упомянутое сокращенное описание было приемлемо для микрособытия, мы все же должны иметь в виду, что физики — это не только люди, интересующиеся физикой и результатами теоретических исследований. Тем результатам, которые правдоподобны,

надежны и живучи, предназначено, в итоге, стать органической составной частью нашей картины мира. Очень многие из наших образованных современников, не обладающие, однако, достаточным математическим уровнем для того, чтобы следить за тонкостями математической техники, все же проявляют глубокую заинтересованность во многих вопросах общего характера; а среди таких вопросов один из наиболее волнующих — правда ли, что *natura facit saltus* или все-таки природа не терпит скачков? Какой бы язык сокращений ни казался нам, физикам, удобным для «внутреннего обращения», мы должны отдавать себе отчет о тех дилеммах, которые справедливо и вполне законно интересуют других; мы должны позаботиться о том, чтобы не затемнять и не искажать эти проблемы, т. е. должны отказывать себе в роскоши небрежных выражений. Именно это я имел в виду в моем общем историческом введении. Наука непохожа на гамлетовский монолог. Она представляет ценность только в рамках своего культурного окружения, только при контакте со всеми теми, кто ныне, а также кто будет в будущем, предан делу обогащения духовной культуры и знаний.

Дошедшие до нас труды Архимеда, как и диалоги и рассуждения Галилея, все еще не перестают вызывать и в наши дни неподдельный интерес, причем не только у филологов, но и у многих ученых. Чтобы оценить, не слишком ли возвышенную и величественную цель ставим мы перед собой, давайте подумаем, между прочим, о том, что станет с нашими научными статьями спустя 2000 лет? Наука изменится всецело.

Захочет ли кто-нибудь вникать в наши рассуждения, как вникаем мы в рассуждения Архимеда?

8. Некоторые детали о столкновениях

Такова первая часть ответа моему воображаемому оппоненту. Часть вторая — более специальная и ее следовало бы подкрепить хотя бы немного математикой, которой мне здесь приходится, увы, избегать. Я сомневаюсь, позволительно ли, когда имеют дело с микрособытиями, например в «задаче о столкновении», произвольно выбирать «начальное состояние» в виде чистых энергетических состояний двух невзаимодействующих систем, полагаясь на принцип чистой суперпозиции. Фактически такая процедура, как правило, приводит к весьма приемлемым результатам в первом приближении, еще имеющем смысл, но к совершенно неприемлемым результатам в следующем приближении. Так вот и получается, что член волнового уравнения, который описывает взаимодействие (порождаемое той относительно малой третьей частью оператора энергии, о которой мы говорили в разделе 5), является, по необходимости, членом нелинейным; член этот должен содержать произведение двух волновых функций, иначе он не мог бы выражать собою источник какого-либо взаимодействия между упомянутыми подсистемами. Таким образом, в силу самой возложенной на него роли, член взаимодействия должен нарушать линейность, а тем самым и ликвидировать чистую и простую суперпозицию. А искомые результаты должны вытекать из этого нелинейного

члена взаимодействия. В таком случае общие математические соображения позволяют нам сделать три утверждения:

1) при любых начальных условиях первое малое изменение, обусловленное членом возмущения, корректно вычисляется из этого члена, несмотря на его нелинейность; однако

2) изменения, вычисленные таким способом, для двух и более исходных ситуаций, не являются просто аддитивными, когда рассматривается начальная ситуация, составленная из этих исходных; имеется существенное взаимное влияние составляющих; более того

3) улучшение первого приближения является весьма непростым мероприятием, если член возмущений нелинеен; принятые ныне физиками методы расчета, насколько я могу судить, следуют схеме линейных возмущений и тем самым не охватывают действительной ситуации.

Можно, разумеется, привести и другие соображения по поводу действительной безнадёжности метода приближений; об этом сейчас обычно говорят как о «расходимостях». Мы не совсем точно назвали оператор взаимодействия «относительно малым». Дело в том, что этот эпитет может корректно применяться не к этому оператору, а только к той величине, которая является результатом применения оператора к другой величине (в нашем случае — к волновым функциям). Результат различен в различных частях поля, где могут встречаться области, в которых упомянутая «относительная малость» не имеет места. Иногда этот факт оправданно игнорируется; несмотря на этот факт, указанный метод приближения дает приемлемые результаты. Но даже и при этом следует быть готовыми к открытию фундаментальных просчетов нынешней теории. Это предубеждение хорошо иллюстрируется самым первым применением указанного метода приближения, приведшего к самому раннему из количественных успешных результатов волновой механики, а именно моим расчетом 1926 г. расщепления спектральных линий атомарного водорода внешним магнитным полем (штарк-эффект). Расчетные значения и частот, и интенсивностей весьма удовлетворительно согласовались с результатами наблюдений. И все-таки немногими годами позднее Корнель Ланцош открыл фундаментальный просчет в моих результатах. По сравнению с полем ядра возмущающее внешнее поле является слабым лишь вблизи ядра, где сильно «внутреннее» поле; такое соотношение силы полей изменяется на обратное уже при умеренных расстояниях, поскольку внутреннее поле быстро затухает по закону обратных квадратов при неизменности внешнего поля. Вследствие этого линии при штарк-эффекте никогда не бывают идеально четкими; этот факт хорошо наблюдаем для спектральных линий высшего порядка при достаточно сильных внешних полях.

Еще один пункт я считаю относящимся к задачам о столкновениях. В конце шестого раздела я уже упоминал о том, что две колеблющиеся микросистемы, причем каждая — действительно точно в одной из своих собственных мод, нельзя мыслить как приближающиеся одна к другой. Дело здесь не в каких-то далеко идущих тонкостях. Просто поступательное движение при точно заданной скорости волномеханически представлено плоской синусоидальной волной, заполняющей все пространство. Поэтому у двух таких плоских волн, одной —

принадлежащей к первой системе, и другой — ко второй системе, будет отсутствовать само специфическое свойство обладания чем-либо, представляющим собой «расстояние друг от друга». Волны эти описывают некоторое состояние, которое включает в себя в качестве потенциальных возможностей разнообразные взаимные состояния — вплоть до самых малых, на которых взаимодействие уже должно быть «в полном разгаре». Так что рискованно выбирать в качестве начального состояния такое, которое включает в себя две упомянутые плоские волны. Выбирая такое начальное состояние, мы тем самым игнорируем возрастание взаимодействия в процессе постепенного сближения систем. Я больше удивлен теми приемлемыми результатами, которые дает эта процедура в первом приближении, чем последующей ее явной непригодностью.

Иногда позволительно думать об одной из систем как о локализованной. В таком случае следовало бы, по крайней мере, иметь наглядное описание другой системы в виде плоской волны с головной волной или с волновым фронтом, приближающимся к точке, где должно иметь место столкновение. Но еще из доквантовой физики известно, что происходящее на фронте волны может в весьма значительной мере отличаться от того стационарного состояния, которое устанавливается рано или поздно вслед за фронтом. Например, А. Зоммерфельд показал, что в том случае, когда плоская электромагнитная волна проникает из вакуума в диэлектрик (наглядно представляемый как состоящий из молекул, содержащих электронные осцилляторы), головная часть этой волны отнюдь не преломляется, не испытывает рефракции по закону Снеллиуса, а продолжает свободно распространяться в том же направлении с неизменной скоростью. Это явление объясняется тем, что электроны первоначально покоятся; набегающий цуг волн охватывает все эти электроны и постепенно раскачивает их, заставляя колебаться с возрастающей амплитудой, пока после прохождения многих волн не достигается равновесное состояние. Эта модель, правда, устарела. Тем не менее, и нынешние методы описания данной физической ситуации по-прежнему следуют такой же схеме.

Я не верю, что сложности «классического» описания ныне ликвидированы. Мне трудно поверить в то, что квантовая физика обладает «отмычкой» для преодоления этих сложностей, без затраты усилий на то, чтобы в них разобраться. В приведенном только что примере, заимствованном из лоренцевской электронной теории, начальное состояние в виде невозмущенной падающей волны и покоящегося электрона весьма существенно отличается от состояния конечного, когда электрон полностью раскачался и его «волнушки» (wavelets) наложились на падающую волну. В самом деле, все эти «волнушки» в совокупности превращают волну первичную, плоскую в совершенно отличную по скорости волну, движущуюся в совершенно ином направлении. В электронной теории Лоренца этот постепенный переход невозможно описать как задачу о «возмущении». Нельзя надеяться, что в квантовой физике метод возмущений все-таки даст исчерпывающий ответ, если только не придерживаться того, что согласно квантовой физике не происходит ничего подобного этому и что весь ее аналитический аппарат предназначен лишь для того, чтобы сообщать нам, с какой вероятностью можно встретить систему,

перепрыгивающую из одного состояния в другое, причем для отбора этих «состояний» откровенно ставится условие, чтобы они удовлетворяли нашим требованиям удобства и доступности аналитического рассмотрения. Но это же все равно, что выдавать желаемое за действительное. Не так ли?

9. О немахизме

Среди физиков, как известно, весьма популярна догма, провозглашаемая философией Эрнста Маха и сводящаяся к тому, что единственной задачей экспериментальной науки является выдача определенных предписаний, предназначенных для успешного предсказания результатов любых будущих измерений по результатам, известным из предыдущих измерений. Если это утверждение, весьма спорное, принимать буквально, то не только окажется неважным для физики, используется ли при этом предписании визуализированная модель или оно состоит только в выполнении строго предписанных математических операций, которые надлежит совершить с уже наблюдавшимися значениями для получения предсказываемых величин, но также окажется, что упомянутые операции могли бы, наверное, даже быть математически некорректными, поскольку требование точности, корректности накладывается не на сами эти операции, а на те пророчества, которые они могут нам давать. И в самом деле: иногда за теоретическими выводами, лишенными строгости, следует ремарка о том, что доказательством справедливости или оправданием данной процедуры является ее успех, т. е. то, что она приводит к результатам, согласующимся с наблюдением. Неомажистский принцип оправдывает и защищает подобную теоретическую аргументацию не только как бы в ожидании настоящего доказательства корректности процедуры теоретического вывода, но и в случае, если была бы доказана ее ложность.

Наверняка никто (даже из сторонников немахизма) не согласится с последним утверждением. Но отчего же? Если наша задача — только предсказывать, точно и корректно, невзирая на средства, то почему бы не делать это при помощи математического «подгона»? Ибо по меньшей мере столько же, сколько это имеет место в любых других естественных науках, в физике научный метод состоит из огромного числа наложенных друг на друга независимых предписаний с общей целью — предсказать. Не обязательно основанные на наглядной модели-картине, эти предписания, если желательно их так абстрактно называть, образуют запутанную схему с усложненной системой внутренних связей. Приходится полагаться на полдюжины таких предписаний даже при проведении простейшего количественного эксперимента — чтобы уточнить грубые числа, зафиксированные на шкалах приборов. Иначе вы не получите то, что называется результатами вашего измерения. Более того, имеются фундаментальные утверждения или предположения, из которых порождаются тысячи ответвлений — выводов, которые как-то объединяются и иной раз в итоге приводят к новым «предсказаниям», имеющим отношение к делу. И в каждом отдельном эксперименте, хотя бы и не новом, эта сеть выводов должна сплетаться заново, приспосабливаться к специфическим данным и обстоятельствам. Эта «схема предписаний» не является удов-

летворительной, если мы не можем положиться на то, что она, при правильном применении, охватывает любое будущее наблюдение.

У нас нет иных средств для осуществления с приемлемой точностью этого применения к новым, к любым случаям, которые не были заранее предусмотрены, для вывода вообще каких-либо заключений относительно этих случаев — кроме как решить раз и навсегда пользоваться только непротиворечивой схемой корректного математического аппарата. Математика — не столь уж специальный предмет. Она представляет собой наиболее общий способ рассмотрения возможных соотношений между числами, избегая противоречий. Отдельная «формула» при условии, что она содержит по меньшей мере одно неизвестное (и не имеет в качестве делителя явный нуль), не может быть «математически неверной». Упомянутые «предписания» теоретической физики содержат по меньшей мере два неизвестных (неопределенных символа): одно, представляющее предыдущее наблюдение, и другое — предсказываемое. Так что ни одно одиночное предписание не может быть математически неверным. Однако мы никогда не имеем дела всего лишь с одним отдельным предписанием. Нам приходится комбинировать множество предписаний в системе рационального мышления. Без какого-то руководящего принципа нам пришлось бы блуждать в потемках. Корректная математика — это и есть самый незаменимый руководящий принцип, даже для самых твердокаменных стопроцентных махистов. Большинство физиков, признают они в этом или нет, пользуется, кроме того, наглядными моделями того или иного рода. Все это мне понадобилось сказать для оправдания моих требований в пользу математической внутренней согласованности при решении задач о столкновениях.

10. Числа

Состояния точно, резко определенной энергии (привилегию которых считать «настоящими» состояниями системы, с внезапными переходами между ними, я категорически оспариваю) подразумевают характерное условие: полное число частиц каждого рода, содержащихся в системе, является целым числом. В соответствии со знаменитым открытием (Эйнштейн, 1905 г.) того, что масса и энергия — это одно и то же, частица массы покоя m , находящаяся в покое, представляет собой энергию величиной mc^2 (c — скорости света в вакууме). Говоря в общих чертах, N одинаковых частиц, содержащихся в системе, дают вклад, равный Nmc^2 , в каждый из резко очерченных энергетических уровней системы в целом, так что уровни эти отличаются друг от друга целыми множителями при mc^2 . Это предположение вполне здравое, если не сказать — неизбежное, хотя мы даже еще и не преуспели в удовлетворительном объяснении различных возможных численных значений масс покоя m , реально наблюдаемых у различных элементарных частиц, таких, как электроны, протоны, разнообразные мезоны и т. д., из которых состоят массы атомов и молекул.

С точки зрения, принятой здесь нами, не следует представлять себе порцию, скажем, газообразного азота, как состоящую из вполне определенного целого числа молекул азота — числа, которое можно как-то зафиксировать.

Согласно нашей точке зрения число молекул должно быть представлено суперпозицией собственных мод при значительном разбросе по многим целочисленным значениям. Желательно было бы оценить величину такого разброса. Но это, могу вас уверить, не столь уж легко. И хотя проблема здесь не сводится к вопросу о флуктуациях, естественно думать, что нам могли бы помочь рассуждения в духе термодинамики. Однако тепловая энергия одной степени свободы ($\frac{1}{2}kT$) столь мала, если не говорить о температурах T в недрах некоторых звезд, по сравнению с энергиями масс покоя mc^2 , что в обычных обстоятельствах ни одна система, содержащая не слишком малую массу, не должна рассматриваться находящейся в истинном термодинамическом равновесии¹.

Напрашивается сама собой следующая попытка ответить на данный вопрос. Наша изолированная порция газообразного азота имеет те же свойства, что и порция, образующая часть гораздо большей порции газа, из которой она выделена лишь фиктивными границами; действительно, ведь наша рассматриваемая порция могла быть получена из гораздо большего объема газа при условии, что упомянутые фиктивные границы были заменены реальными. Каждый физик согласится с тем, что число N молекул, содержащихся в некотором объеме, выделенном лишь мысленно, проявляет флуктуации порядка $\sqrt{N}$. Я считаю вполне разумным предположение о том, что волновая функция изолированной системы должна, вообще говоря, состоять из собственных функций, значения N для которых испытывают разброс в диапазоне порядка $\sqrt{N}$.

Могут спросить, а в чем состоит разница? Как это проверить экспериментально? Так вот, самая главная разница — в том, что мое предположение разумно, в то время как не вполне разумно признавать точно определенным подсчет N объектов, которые общепризнанно лишены индивидуальности*. Во-вторых, мое предположение является очевидным способом регистрации того факта, что мы никогда не экспериментируем с одним-единственным электроном, атомом или (малой) молекулой. В мысленных опытах мы иногда предполагаем, что экспериментируем с одной частицей, и это, несомненно, приводит к необходимости нелепейших следствий, таких, например, как то, что сферическая дебройлевская волна, которой предназначено представлять «один» электрон, движущийся в «неизвестном» направлении, внезапно сплющивается, превращаясь в небольшой волновой пакет, когда «этот» электрон детектируется в виде определенного пятна. Ничего подобного не случилось бы, если бы число «один» не считалось достоверно установленным и количество электронов могло бы составлять с таким же успехом нуль, как и быть равным двум или трем². Даже лучше: достоверная регистрация одного электрона

¹ Автор развивает эту мысль в своей «Статистической термодинамике», в гл. VIII (имеется русский перевод первого издания; последнее англ. изд. Кембриджского ун-та, 1967 г.); см. также работы Толмена и Эддингтона. — *Прим. перев.*

* Недостаточная индивидуальность микросистем обсуждается в моей статье в июльском номере «*Endeavour*» за 1950 г., т. 9, № 35.

² При единице в среднем. — *Прим. перев.*

не уменьшает ожидаемые шансы регистрации второго или третьего; регистрация оставит эти шансы неизменными — в соответствии с общепринятыми принципами статистики. И еще я собираюсь сказать то, о чем никогда не пожалую — что мы крайне нуждаемся в этих сферических волнах как в реальности (а не просто как в способе выразить недостаточность нашего знания), если мы желаем объяснить, например, прекрасные эксперименты Г. П. Томсона по получению интерференционных картин от волн де Бройля, дифрагированных на кристаллах; то же самое можно сказать о многих и многих других случаях.

11. Наблюдение отдельных частиц

Я пишу эти строки, глядя на мои любимые снимки треков отдельных частиц, а также на снимки «звезд» (расщепления ядер), «космических ливней» частиц, на изломанные треки, показывающие последовательные распады одной частицы ($\tau \rightarrow \mu \rightarrow e$), на снимки-копии фотоэмульсионных регистраций, которые С. П. Поуэлл сам отобрал для иллюстраций к своей Нобелевской лекции о космическом излучении в 1950 г. И я спрашиваю себя, разве из этих снимков, как и из треков частиц в вильсоновской камере, не видно, что мы действительно экспериментируем с совершенно определенным числом частиц, а в некоторых случаях и на самом деле только с одной частицей? И разве перед нами не регистрации квантовых переходов, которые я столь страстно отрицаю?

Во-первых, следует сказать, для ясности, что мы не экспериментируем с одиночными частицами. Возможностей экспериментировать с одной частицей у нас нисколько не больше, чем надежд на водворение в зоопарк ихтиозавра. Нам не остается ничего иного, как тщательно изучать результаты регистраций событий, которые давным-давно свершились. Укорочение временного интервала, в течение которого производились регистрации, не делает разницу между случаем отдельной частицы и случаем с ихтиозавром принципиальной. Ибо мы никогда не воспроизводим одно и то же событие с одиночной частицей при условиях, контролируемых по точному плану; именно такова типичная процедура эксперимента с частицами.

Но теперь обратимся к другому вопросу: разве при этом не регистрируются квантовые переходы? Нет, это не регистрация квантовых переходов, ибо регистрации эти несомненно не показывают нам никакого преобразования пары плоских волн (представляющих сталкивающиеся частицы перед столкновением) в некоторое число других плоских волн (представляющих частицы после столкновения). В этом месте меня перебьют мои оппоненты: «Вот-вот, как раз об этом и речь. Именно поэтому ваши волны следует рассматривать не как реальное наблюдаемое явление, а всего лишь как нечто, символизирующее вероятность наблюдения явления с регистрацией только частиц». Но ведь я только что упоминал, что имеется множество экспериментов, которые мы просто не в состоянии объяснить, не считая эти волны именно волнами, воздействующими на целую область, по которой они распространяются, а не находящимися «возможно здесь — возможно там», как было бы согласно вероятностной точке зрения. Я еще вернусь к этому пункту.

Реальной трудностью волнового аспекта является точное соблюдение при отдельном событии баланса энергии (и импульса), о котором явно свидетельствуют упомянутые регистрации (на фотопластинке или в камере Вильсона). Ограничимся простейшим случаем: рассмотрим альфа-частицу с данной начальной скоростью в вильсоновской камере. Такая частица дает трек вполне определенного размера; она всегда останавливается, пройдя определенное расстояние, 5 см, скажем. Произведя некоторое число актов ионизации, практически всегда одно и то же, соответствующее расходу своей кинетической энергии, частица в итоге останавливается. Разве мы можем понять этот процесс, если будем считать, что ионизация означает не передачу порций энергии, а только явление резонанса? Да, это неплохой аргумент. Однако трудность в таком понимании процесса торможения частицы исчезает, если это торможение обусловлено статическим полем — гравитационным или электрическим, против сил которого движется частица. В последнем случае, если мы представим себе частицу наглядно в виде сложного волнового образования (обычно называемого «волновым пакетом»), то оно, в соответствии с волновой теорией, действительно испытает в целом замедление и придет, на том же расстоянии, в состояние покоя в целом, когда его «кинетическая энергия растрачена». Происходящее сводится к тому, что все части рассматриваемой системы медленно, «адиабатически» увеличивают свою длину волны в процессе объединения. Для лучшего понимания реального случая, о котором идет речь, стоит придерживаться такой точки зрения: ионизирующая среда воздействует на частицу, проходящую сквозь нее, так же адиабатически, как на нее действовало бы некоторое поле. Почему бы не считать такую точку зрения совершенно приемлемой; раз мы уже решились избавиться от того наваждения, что физические процессы состоят в непрерывных последовательных мелких «припадках и судорогах», в передаче «из рук в руки» порций энергии от одной частицы (или группы частиц) к другой?

Я уверен, что даже явно катастрофические события (в микромире) не обязывают нас принимать «воззрения припадков и судорог»; я здесь имею в виду явления, регистрируемые как «звезды», которые позволяют видеть ядра, разорванные на куски соударением с быстрой частицей. Эти явления происходят лишь при воздействии чрезвычайно быстрых частиц, дебройлевские волны которых обладают чрезвычайно высокой частотой. А это как раз наводит на мысль о том, что и эти явления также могут оказаться «медленными», адиабатическими процессами, ибо критерий «медленности» всегда состоит в том, что процесс должен быть медленным в сравнении с быстро осциллирующим волновым полем. Приходится, разумеется, пользоваться вспомогательной концепцией, знакомой физикам-квантовикам, — концепцией волновых пакетов в пространстве более чем трех измерений; на самом деле число измерений этого пространства втрое превышает число частиц, участвующих в игре. Распространяться на эту тему здесь на более обобщенном уровне не стоит. К тому же я вполне сознаю, что в конце-то концов здесь так и остался без ответа важнейший вопрос: что же такое эти наглядно представляемые частицы? Допустимо ли такое понимание, при котором эти частицы располагаются в пределах непрерывных цугов волн — как нечто вроде белесых

гребешков на волнуемом море — и что в некоторых случаях они составляют единственную наблюдаемую особенность таких волновых цугов? Я отдаю себе полный отчет о сущности этих вопросов. Они, я бы сказал, уж не столь нам страшны. И прежде чем углубиться в их сущность, мы сейчас зададимся вопросом несколько иным: чем наверняка не являются частицы (микромира)? Так вот они не являются чем-то долговечным, маленьким, обладающим индивидуальностью *.

Однако я позволю себе вообразить некоего оппонента, которому наши предыдущие рассуждения кажутся неубедительными объяснениями и пустой болтовней. Его я должен просить выслушать еще следующий довод.

Явления, регистрируемые вильсоновской камерой и с помощью фотоэмульсий, хотя и находятся ныне в центре внимания, в конце концов представляют лишь небольшой раздел всего того, что мы знаем о природе. В своей кажущейся простоте они будят живое воображение юного ума. От юношеского восторга, вызванного этими фотографиями, перехватило бы дыхание у любого из ветеранов битвы за атомизм — от Демокрита до Дальтона и Больцмана. И все-таки процессы эти далеко не такие простые, какими кажутся на снимках. Свидетельство этому — страница за страницей сложнейших формул, зачастую необходимых для объяснения даже простейших треков. Нам не следует проявлять излишнего проворства в устранении очевидных трудностей, преподносимых этими новыми и беспрецедентными экспериментами — устранении путем такой перелицовки нашей физической картины мира, после которой картина эта уже неспособна привести нас к пониманию огромного множества других вещей, которые пока не в моде.

Например, если просмотреть вводные главы известных монографий Макса фон Лауэ по дифракции рентгеновских лучей ** и по дифракции волн материи ***, то обнаруживается следующее: еще не открыто какого-либо способа рассуждения, позволяющего продвинуться в этих вопросах хотя бы на шаг без того, чтобы считать волновые функции — для максвелловского поля и для дебройлевских амплитуд, как в случае падающей волны, так и для волн, с которыми падающая встречается в дифракционном теле, — описывающими нечто реальное. Здесь «реальное» — это не какой-то спорный философский термин. Данное слово здесь означает, что волна действует одновременно по всей покрываемой ею области, а не «либо здесь — либо там». Последняя интерпретация была бы непригодна для объяснения явлений интерференции. Так что эпитет «реальное» означает здесь существенную разницу между «как-так и» (et-et) и «либо-либо» (aut-aut) в квантовой механике. Хотел бы я знать, кто способен опровергнуть это существенное наличие такого несогласования. Не думаю, что от этого противоречия можно как-либо избавиться. Ибо если вы придерживаетесь общепринятой вероятностной интерпретации (aut-aut) квантовой механики, то вам сравнительно легко будет взяться за истолкование наблюдения над одиночным событием, но ко всей остальной физике (той, что пока не в моде) вы останетесь слепы.

* См. мою статью в журнале «Endeavour», 1950 г., т. 9, № 35.

** Roentgenstrahlinterferenzen. — Acad. verl. Ges., 1941.

*** Materiewellen und ihre Interferenzen. — Ibid., 1948.

РЕЛЯТИВИСТСКАЯ КВАНТОВАЯ ТЕОРИЯ¹

Обсуждение основных аспектов двух теорий: специальной теории относительности и квантовой механики представляет несомненный интерес. Мне кажется, что между ними все еще имеется фундаментальное несоответствие, несмотря на все усилия, которые были предприняты в квантовой механике для того, чтобы «представить всю ее в лоренц-инвариантной форме». Если бы меня попросили указать несоответствие в общих чертах, мне кажется следовало бы упомянуть два пункта. Во-первых, закладывая основы специальной теории относительности, необходимо постоянно проделывать «мысленные эксперименты» с часами и измерительными стержнями, которые предполагаются находящимися в покое или в определенном состоянии движения по отношению друг к другу, при этом, во всяком случае, часам и концам измерительных стержней приписываются определенные значения координат и тем самым определенные положения в используемой системе координат. Но согласно соотношению неопределенностей в квантовой механике этого сделать нельзя или это можно сделать только приблизительно для достаточно тяжелых часов и измеряющих стержней. Это, казалось бы, должно ограничивать область применения специальной теории относительности макроскопическими масштабами, что представляется крайне неудовлетворительным; более того, специальная теория относительности оказывается эффективной при применении ее к атомам или даже к элементарным частицам, например, при рассмотрении доплер-эффекта в атомах или времени распада высокоэнергетичных мезонов, пролетающих через атмосферу (в последнем случае релятивистское изменение времени распада—эффект не малый, он представляет собой множитель порядка 50 или 100).

Во-вторых, современная вероятностная интерпретация квантовой механики заключается в методике вычисления вероятности нахождения системы в определенном состоянии в данное время. Упомянутая методика состоит в том, что используются значения определенной функции координат и времени (они интегрируются по пространству), т. е. используются одновременные значения этой функции. При преобразовании Лоренца, когда преобразуются координаты и время, т. е. в другой лоренцевой системе координат, происходят две вещи. Во-первых, меняется весь набор вероятностных задач,

¹ E. Schrödinger. Brit. J. Philos. Sci., 1954, 4, 328 (выдержка из частного письма, касающаяся возможной дискуссии о релятивистской квантовой теории, напечатанная в журнале с разрешения Шредингера). Перевод О. В. Кузнецовой.

так как данная область в данный момент времени в одной системе координат в новой системе координат уже не является той же самой областью в этот же момент времени. Во-вторых, полный набор одновременных значений функции (координат и времени), с помощью которой вычисляются вероятности, в новой системе координат будет другим. Это будет иметь место не только из-за локального преобразования, но и потому, что в новой системе координат пространственно-подобное поперечное сечение (пространственно-временного многообразия), на котором необходимо рассматривать указанную функцию, окажется совершенно иным. Это подобно различию двух плоскостей, пересекающих друг друга под определенным углом. Поэтому неясно, являются ли два набора ответов на два набора вероятностных вопросов всегда полностью эквивалентными, каковыми они, конечно, должны быть. Я знаю, что в последние годы над этим вопросом много размышляли, но я не слишком хорошо информирован в этой области. Релятивистское волновое уравнение Дирака по-прежнему рассматривается как большой успех, которым была отмечена вся эта проблематика. Мне кажется, что для уравнения Дирака вероятности положения согласуются во всех системах координат, что является следствием уравнения непрерывности для четырех величин, которое соответствует четырехмерному току и может быть интерпретировано в любой системе координат как вероятность нахождения внутри данного элемента объема или вероятность перехода через определенные элементы поверхности за данный промежуток времени.

ИЗМЕРЕНИЕ ДЛИНЫ И УГЛА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ ¹

Я хочу показать, что в общепринятой теории связь между операторами и наблюдениями очень сложна именно в простейших случаях.

Вы даете мне осколок кристалла алмаза. Его функция-состояние должна быть антисимметричной функцией координат x_k n ядер углерода, из которых состоит образец. Может ли такая функция дать информацию о форме осколка? Индекс k не связан ни с какой координатой, ни с какой точкой кристаллической решетки! Допустим, осколок иглообразной формы. Я могу измерить его длину. Какой оператор связан с этим измерением? Мы должны помнить, что только операторы, симметричные относительно всех x_k , имеют смысл. Единственный ответ, который я могу дать на последний вопрос, такой. Пусть $r_{kl} \geq 0$ — расстояние между k -м и l -м ядром углерода ($k \neq l$). Пусть F — симметричная функция $n(n-1)/2$ переменных r_{kl} , величина F равна наибольшему из ее аргументов. (Это не противоречит ее симметрии; например, для $n=3$ F должна быть функцией трех переменных r_{12}, r_{23}, r_{31} , постоянной на полуповерхности определенных кубов, по величине равной ребру куба.) Эта функция $F(r_{kl})$ может быть связана с измерением длины иглы. Для того чтобы рассчитать всю наблюдаемую форму твердого тела, необходимо обобщить построение, используя в качестве аргументов F не взаимные расстояния, а декартовы координаты ядер относительно центра тяжести. Но является ли такой ответ удовлетворительным? Элементами формы, которые больше всего нас интересуют в случае кристалла, являются углы между различными плоскими областями на его поверхности. И, конечно, наиболее распространенное измерение при изучении внешней формы кристалла — это измерение угла между двумя плоскостями кристалла. Даже исследованию отдельного кристалла с помощью рентгеновских лучей обычно предшествует тщательная ориентировка его относительно данной системы координат; это соответствует угловым измерениям подобного рода. Для всех этих целей не требуется ни измерение длины кристалла, ни другие обычно выполняемые операции. Трудно представить себе, как существующая теория должна связать эрмитов оператор с этим широко распространенным типом лабораторных измерений.

5 января 1954 г.

¹ E. Schrödinger. Nature, 1954, 173, 442. Перевод О. В. Кузнецовой.

ФИЛОСОФИЯ ЭКСПЕРИМЕНТА¹

1. Принятая схема

В квантовой механике (поскольку в настоящее время к ней обращаются в связи с проблемами эксперимента) приняты следующие понятия: определенная физическая система, с которой мы имеем дело; она может быть и не изолированной, но должна обладать достаточной индивидуальностью, чтобы ее можно было отличить от других частей физического мира; природа этой системы и ее взаимодействия с окружением, в которое включается и экспериментатор со своими измерительными устройствами; состояние, в котором система находится (некоторые предпочитают говорить — в котором систему находят) в данный момент; измерения, проводимые над системой.

По мнению наиболее сдержанных и осмотрительных физиков, объективность физической науки состоит в определении того, что может быть названо траекторией состояний системы, и в предсказании ее развития во времени. Средством, с помощью которого делают предсказания, а также проверяют их, являются измерения. Траектория, стало быть, позволяет предвидеть результаты последующих измерений, если известны результаты предыдущих. Хотя такое предвидение, как правило, неточно и носит вероятностный характер, существуют вполне определенные способы изображать «состояние»; для этого служат вектор состояния или функция состояния. Предполагается, что в интервале между измерениями они изменяются, причем закон их изменения точно известен (если известна природа системы) и точно определяет вероятность предсказания любого измерения в любой данный момент.

Здесь следует заметить, что термины «предсказание», «предвидение», «предшествующее», «последующее» надо понимать так, чтобы включить предельный случай, когда интервал времени между двумя измерениями, из которых одно служит источником предсказания относительно второго, обращается в нуль. Этот предельный случай не тривиален и совсем не так прост, ибо над одной и той же системой можно провести множество непосредственно следующих друг за другом пар измерений, но даже в этом случае результат первого измерения не позволяет дать однозначное предсказание результата второго. Предсказание сохраняет вероятностный характер.

Природа системы описывается, во-первых, специфическими переменными, от которых зависит ее функция состояния, и затем так называемым гамильтоновым оператором, определяющим дифференциальное уравнение в частных производных, согласно которому изменяется функция состояния в отсутствие

E. Schrödinger. Nuovo Cimento, 1955, 1, 5. Перевод А. В. Ахутина.

возмущающего действия наблюдателя. Природа взаимодействия между системой и прибором описывается особым оператором, который соответствует данному измерительному устройству; знание этого оператора для предсказаний необходимо.

Чтобы результат одного измерения мог служить для определения вероятного результата следующего, т. е. чтобы измерение вообще могло служить какой-нибудь цели, должна быть полностью известна природа системы; исключение составляет тот предельный случай, когда временной интервал, о котором мы говорили выше, обращается в нуль. Ведь до тех пор, пока не известен гамильтониан, нельзя узнать, как изменяется состояние системы в промежутке между двумя измерениями. Конечно, могут встретиться и «константы движения», когда измерительные устройства, для которых делается предсказание, не могут изменяться во времени. Это такие устройства, соответствующие операторы которых коммутируют с гамильтонианом. Но чтобы выяснить, имеет ли это место, нужно знать гамильтониан системы.

В рамках временного промежутка между измерениями знание природы системы не играет роли. Но здесь речь идет только о небольшой совокупности основных кинематических понятий, главным образом о таких, которые занимали уже заметное место в динамике с тех пор, как она существует, задолго до появления квантовой теории. В этом случае предсказание основано на коммутационных соотношениях между соответствующими операторами. Хорошо известный пример представляют собой декартовы координаты центра масс и составляющие его скорости. Точное определение одной из составляющих делает равновероятным любое значение соответствующей координаты. То же самое имеет место вообще для любого наблюдаемого параметра и его канонически сопряженного; например, для так называемой угловой переменной и соответствующей ей переменной действия (в условно периодической системе). Другим примером, представляющим особый интерес, является полный угловой момент и три его декартовы составляющие. Если его абсолютная величина и величина одной из его составляющих точно определены (а это может быть сделано, так как соответствующие им операторы коммутируют), тогда абсолютная величина (но не направление) составляющей, ортогональной той, которая была измерена, может быть точно указана, так как из коммутационных соотношений между соответствующими операторами может быть вычислено распределение вероятности для составляющих в любом избранном направлении на этой ортогональной плоскости.

Не обязательно при этом знать аналитическое выражение операторов через переменные, от которых зависит функция состояния системы, и, разумеется, не обязательно что-либо знать ни об этих переменных, ни какие-либо детали о природе системы. Но это исключительные случаи, четко ограниченные рамками «отличного от нуля временного промежутка между двумя измерениями» (физики окрестили их квантовой кинематикой в противоположность квантовой динамике). В этой статье мы будем заниматься общим случаем.

2. Принятая схема претендует на философскую чистоту

Момент, на который я хочу обратить внимание, состоит в следующем. Обрисованный выше метод предсказания (без аналитических деталей, которые физики хорошо знают, но которые доставили бы много трудностей нематематикам), составляет фундамент современной квантовой теории. Но и независимо от этого мы должны исследовать вопрос, насколько правомерны претензии этого метода быть законченной теорией измерений, принципиально применимой во всех случаях. В кратком анализе я надеюсь показать, что они весьма далеки от этого. Скажем сразу, подавляющее большинство измерений, проводимых в лаборатории, имеют совершенно иной характер и никак не укладываются в описанную схему. Вопрос, имеются ли вообще измерения, соответствующие этой схеме, сравнительно менее важен, и мы коснемся его позже.

Если только моя точка зрения верна, эта схема является лишь искусным мысленным изобретением, схемой на бумаге. Само по себе это не является чем-то плохим. Те составные части, из которых строились великие теории XIX и XX вв. (теории Максвелла, Гиббса, Больцмана, Лоренца, Планка, Эйнштейна), были, разумеется, именно такого рода — мысленные картины, которые только после предварительной разработки давали теоретически обоснованные результаты, проверяемые на опыте. Но в настоящее время дело изменилось. Квантовая механика утверждает, что она прямо и непосредственно имеет дело не с чем иным, как с актуальными наблюдениями, что они суть единственно реальные вещи, единственный источник информации, и это информация только о них.

Теория измерения тщательно формулирует условия, при которых она становится эпистемологически неприступной. Вопрос стоит не о том, что есть или чего нет в определенный момент, а о том, что мы обнаружили бы, если бы сделали то или другое измерение; теория же строится только о функциональной связи между двумя определенными группами результатов наблюдения.

Но ради чего вся эта эпистемологическая суеда, если мы должны иметь дело не с действительными реальными данными «во плоти», а с воображаемыми? Или еще хуже — не терпит ли крушение вся эпистемология нашей схемы, если вообще существуют некие измерения, доставляющие ценную информацию, но не укладывающиеся в нашу схему?

3. Лабораторная схема отличается от принятой

В физической лаборатории (в противоположность астрономической обсерватории) для нас не так часто представляет интерес будущая история тела или системы, над которыми мы производили измерения. Наиболее широкая категория измерений имеет дело с постоянными характеристиками материала (такими, как плотность, сжимаемость, модуль Юнга, удельная теплота, электрическая или тепловая проводимость, поверхностное натяжение, вязкость и т. д.). Конкретный физический объект является всего лишь экземпляром вещества и может быть после измерения выброшен в мусорный ящик. Полученные результаты могут быть далее использованы в сотне случаев, но обычно не используются для того, чтобы предсказывать будущее поведение выбранного экземпляра. Когда важным становится движение или в более общем случае изменение со временем, то чаще всего речь идет об измерительном инструменте (игла гальванометра или электрометра, пучок катодных лучей на экране осциллографа), а не об исследуемом объекте. Эти замечания относятся не только к старомодным исследованиям, но и к областям, весьма существенным для квантовой теории: к излучению черного тела, спектрометрии, масс-спектрометрии, ядерному магнетизму и т. д.

Следует упомянуть и противоположные примеры: прямое наблюдение радиоактивного распада или определение скорости медленной химической реакции, когда образцы исследуются на протяжении многих часов или даже дней. Ближайшее подобие квантовомеханической схеме, как мне кажется, имеется в синтетической химии при производстве лекарств. Здесь мы действительно исполняем ряд тщательно предписанных препаративных операций, включающих множество измерений, с единственной целью получить вещество, химические свойства которого мы можем предсказать. Это широкая и важная, хотя и весьма специальная ветвь физической науки. Не следует ли, однако, возвести на этот же уровень производство научных инструментов? Посредством определенной обработки сырого материала мы производим систему — инструмент — с весьма особыми, хорошо предсказываемыми свойствами. Сейчас я не хочу решать эту проблему и прошу рассматривать ее как замечание на полях.

Как же обстоит дело с тем фактом, что существует, во всяком случае, целый ряд действующих измерительных устройств, которые постоянно используются, но кажутся столь мало соответствующими квантовомеханической теории измерения? Так ли это на самом деле или же можно найти такой угол зрения, под которым откроется их соответствие? Нет, это действительно так и нетрудно указать причину и даже сформулировать ее в соответствии с понятиями и терминологией самой квантовой механики.

4. Астрономия — прототип физической теории...

Обе формы квантовой механики (матричная и волновая) происходят из аналитической механики. Обе опираются на основные центральные теоремы, которыми эта теория — наиболее совершенная и стройная из всех физических теорий — обязана Гамильтону и Якоби. Заметим, между прочим, что обе группы исследователей, хотя и руководствовались при создании новой науки строением аналитической механики, шли, однако, весьма различными путями, и было весьма неожиданно найти в результате одну и ту же математическую конструкцию, к которой они пришли как бы помимо своей воли.

Первая форма квантовой механики (Гейзенберг, Бор) непосредственно подводила к аксиоме (теперь ее обычно называют теоремой), которая определяла все содержание теории и обладала опасной привлекательностью: уравнения движения должны быть *au pied de la lettre* заимствованы из аналитической механики, но переменные, изменения которых во времени эти уравнения описывают и числовые значения которых в любой момент времени характеризуют в аналитической механике мгновенное состояние системы, следует теперь рассматривать как нечто совершенно иное. Они не являются обычными числами; произведение произвольной пары переменных зависит, вообще говоря, от порядка множителей; «коммутационные соотношения» становятся чрезвычайно важными. Они представляют собой источники информации, от которых зависит наше знание о состоянии системы в определенный момент времени. Но одни только эти соотношения, даже если они и полностью известны нам, абсолютно ничего не говорят о состоянии (или даже о вероятности состояния), а только о природе системы, о возможностях (о различии между состоянием и природой системы см. раздел 1). Вот почему я назвал эту аксиому-теорему опасно привлекательной. Здесь те же самые уравнения движения составлены для величин, которые обычно и называются одинаково и изображаются одними и теми же символами, и эта кажущаяся простота склоняет нас к тому, чтобы приуменьшить происшедшее изменение. Тем более, что аналогия с аналитической механикой заходит еще дальше.

На ранних стадиях развития матричной механики функция состояния отсутствовала; впоследствии она была введена в волновой механике. Так вот, если она задана для некоторого момента времени, например для $t=0$, то некоммутирующие величины, которые входят в уравнение движения, дадут нам полную информацию о состоянии системы в любой другой момент времени. Таким образом, знание функции состояния в определенный момент времени, как кажется, аналогично знанию начальных условий (или постоянных интегрирования) в аналитической механике. Более того, точно так же, как в аналитической механике, информация общего характера может быть получена из одних только уравнений движения: например, если из уравнений следует, что некоммутирующий аналог величины не изменяется во времени, это означает, что любая информация, которую мы можем получить об этой величине (точная или вероятностная), не изменяется со временем. (Ясно, однако, что эта общая информация о постоянстве относится к природе системы, а не к ее состоянию.)

Я должен извиниться за то, что, может быть, сверх необходимости вхожу в детали, так как ориентируюсь на читателя нематематика. Возвращаюсь к главному. Аналитическая механика возникла из небесной механики, начала которой заложил Ньютон. Чудесная точность, с которой ньютоновские законы предсказывают движение небесных тел, точность, ничего подобного которой до сих пор нет ни в одной другой области знания, сделала механику образцом точной физической науки. Все модели материального мира с целью расчета его поведения строились по ньютоновскому образцу. Они были связаны с этим образцом не только потому, что существовала надежда или преобладала тенденция объяснять все механически, но и по гораздо более глубокой причине. Ведь, в принципе, действительно не важно (хотя математические методы будут существенно иными), задаю ли я начальные скорости и положения совокупности частиц, каждая из которых притягивается и отталкивается известными или принятыми в качестве известных силами, и затем спрашиваю, каков будет вид этой совокупности в некоторый заданный момент времени, или же моя система включает поле переменных, которые непрерывно распределены в пространстве и управляются законами, связывающими их друг с другом и с движением частиц. Строгое следование ньютоновскому образцу состоит в следующем неприменимом требовании: если дано начальное состояние частиц и полей, то законы, о которых идет речь, должны определять их состояние в любой заданный момент времени; как это и было в ньютоновской механике, они должны задавать траекторию системы в целом (несмотря на то, что абсолютно невозможно проверить бесконечное множество данных, связанных даже с одним таким состоянием).

5. ... Но не физического эксперимента.

Таким образом, идеал точной физической науки был унаследован от астрономии: мы решаем, что пробным камнем любой теории будет ее способность предсказывать характеристики системы в любой наперед заданный момент, если только имеются достаточно однозначные результаты наблюдений, произведенных над системой в некоторый предшествовавший момент. Это представляется надежным основанием для понимания физических событий, и, смею сказать, единственным прочным основанием из всех, какие были до сих пор предложены. Если в наше время обнаружилось, что природа не такова, что в ней не во всех случаях возможно такое предсказание, а иногда может быть дана только вероятностная информация, это, конечно, крайне интересно, но это не приводит к фундаментальному изменению теоретического идеала, если только вероятности предсказаны точно (а все согласны, что так оно и есть). Во всяком случае, не это я хочу здесь анализировать.

Но в этом, вообще говоря, состоит наибольшее различие между наблюдательной астрономией и физической наукой. Как до, так и после открытия Ньютоном его фундаментальных законов реальные наблюдения в астрономии были и остаются именно такими, удовлетворяющими идеальному образцу (модель его, как я сказал, появилась только после Ньютона). Фиксируется несколько положений планеты, — но не одно, так как необходимо знание

скорости, и, сверх того, наблюдаются только два угла, а третья пространственная координата должна быть введена каким-нибудь иным способом. Из этих данных вычисляется положение планеты в некоторый заданный момент времени и результаты сравниваются с наблюдением. При этом подразумевается, что известен ньютоновский закон. Но даже до того, как был открыт этот закон, реальные наблюдения в астрономии были того же самого рода. Только предсказания тогда не очень заслуживали доверия. Известно, однако, сколь преуспел гений Кеплера, когда, используя огромный материал наблюдений, он открыл реальные факты, которые носят имя законов Кеплера. Известно также, что Ньютон именно из них извлек как общий закон движения, так и закон тяготения, благодаря чему сделал в дальнейшем возможными точные предсказания.

Однако, хотя во всей последующей физической науке воспроизводился и сохранялся тот же образец мышления, его находили слишком узким и в большинстве случаев вообще неподходящим для реального процесса наблюдения. Наблюдения часто полностью отличаются друг от друга и принадлежат к самым разнообразным типам (как мы пояснили ранее, в разделе 3). Но мы не только не удовлетворяем ньютоновской установке — познание законов и проверка предсказаний, — мы не удовлетворяем также и кеплеровской. Цель наших поисков — природа системы, а не ее состояние. Более того, даже в понимании того, что мы хотим знать, мы не следуем методу Кеплера. Рассматривая систему, которая движется или меняет свое состояние, мы очень редко действуем по методу наблюдательной астрономии; т. е. посредством тщательной регистрации наблюдаемых характеристик системы как функций от времени. Однажды мне посчастливилось руководить первоклассным физическим практикумом. За исключением машины Атвуда (которая представляет собой просто наклонную плоскость) и, может быть, наблюдений над маятником и т. п., я не помню ни одного эксперимента, который исполнялся бы в согласии с этим методом, но помню множество экспериментов, основанных на совершенно ином подходе. Правда, это было в начале 10-х годов, но я не думаю, что ситуация с тех пор изменилась как в практикумах, так и в исследовательских лабораториях.

6. Мертвая точка квантовой механики

Квантовая механика сформировалась после аналитической механики, которая, в свою очередь, возникла из астрономии. В квантовой механике с самого начала имелся новый и интригующий момент, связанный с тем, что ее предсказания нельзя считать однозначными, что они имеют вероятностный характер. Для разработки схемы, которая приспособила бы новую ситуацию к теоретическому образцу (аналитическая механика) и достаточно тесно связала бы новую теорию с ним, чтобы квантовая механика могла использовать аналитическую механику в своих целях, было проявлено много живого интереса и вложено много честного труда и не оставалось ни времени, ни сил, чтобы заметить, как далеки методы экспериментально-лабораторного ис-

следования от методов астрономии, к которым они никогда и не были очень близки. Возможно, решили, что новая схема (квантовая механика), т. е. аналитическая механика, исправленная так, чтобы она могла давать только вероятностные предсказания, позволяет применять ее прямо к реальным лабораторным измерениям (на что аналитическая механика никогда не претендовала, за исключением таких простых случаев, как машина Атвуда или маятник).

Как бы то ни было, претензия заявлена. Новая наука самонадеянно присваивает себе право третировать все наше философское воззрение. Она утверждала, что те тонкие измерения, с которыми легко обходится квантовомеханический формализм, действительно могут быть сделаны. Но это невозможно. (Я имею в виду гамма-микроскоп, локализацию электрона в «данном» атоме водорода и тому подобное.) Действительные измерения единичной индивидуальной системы никогда не считались столь фундаментальными, потому что теория не приспособлена к ним. В этом еще нет ничего плохого. Возражение вызывает только философская презумпция, которая признает реальность чего угодно, если только квантовый теоретик предпочтет считать это измеримым, так как при этом закрывают глаза на тот факт, что интерпретации в квантовомеханической схеме поддается очень мало действительных измерительных устройств, если таковые вообще имеются.

Можно, конечно, считать, что в конце концов только полный набор всех наблюдений, которые уже были сделаны и когда-либо будут еще сделаны, представляет собой реальность, — единственный предмет, с которым имеет дело физическая наука. Такой взгляд хоть и не очевиден, но заслуживает обсуждения. Однако подобное утверждение, высказанное по отношению ко всем наблюдениям, проведенным в рамках квантовомеханической теории, не имеет разумного основания и не может претендовать на философскую серьезность, потому что на самом деле такие наблюдения не были сделаны, а действительно проведенные наблюдения, на которых и основывается физическая наука, отличаются от полного объема наблюдений. Говоря так резко, я вовсе не хочу обидеть моих друзей, придерживающихся этой точки зрения (не сознавая, как обстоит дело). Но я хочу ясно сказать, что отныне и впредь беру на себя всю ответственность за свое упрямство. Я иду против течения. Но направление потока изменится.

7. Наша цель — общие законы

В конце третьего раздела я обещал показать на языке квантовой механики, почему большинство реальных лабораторных устройств не соответствуют ее схеме предсказания. После того как будет указано их истинное место в рамках принятой теории, станет ясно, почему они не могут исполнять не свойственную им функцию.

Ситуация совершенно очевидна. Схема предсказания (во всех случаях за исключением небольшого числа хорошо известных примеров, см. раздел 1) имеет дело с измерениями систем, природа которых известна. Эксперимен-

тальное исследование почти всегда относится к выяснению природы испытуемой системы. Его место отчетливо определено, и оно проводится раньше, чем начинает действовать схема предсказания. Задача экспериментального исследования соответствует задаче Кеплера, а не задачам посленьютоновских астрономов. (Заметим, между прочим, что они тоже прошли стадию вопросов о природе их системы: о массе планет, об инерциальной структуре, о подходящей временной переменной, так как вращение Земли неравномерно.) Короче говоря, экспериментальное исследование интересуется общими законами, а не случайными состояниями.

Так обстоит дело в астрономии. Может быть, однако, что случайные состояния планетной системы будут иметь первостепенное практическое значение для географии или навигации. А во-вторых, может случиться, что только кропотливое согласование временной последовательности состояний будет единственно подходящим средством для ответа на вопрос о природе системы. Подобно тому как этим методом пользовались в доньютоновскую эпоху, например в трудах Кеплера, он мог быть полезным и после Ньютона, например при установлении торможения земного вращения, связанного с приливами и отливами. Причина здесь в том, что астроном не имеет никаких средств взаимодействия со своей системой: он не может делать ничего, кроме наблюдений.

Конечно, метод установлений общих законов в экспериментальной физике мог бы быть тем же, что и в астрономии. Если бы это было так, то квантовомеханическая теория измерений была бы в полном порядке. Однако это не так, и здесь нет ничего удивительного. Физик имеет полную свободу взаимодействовать со своим объектом и произвольно устанавливать условия эксперимента. Это дает ему возможность изобретать такие методы исследования, которые весьма отличаются от спокойных наблюдений астрономов и далеко превосходят их.

Используя язык квантовой механики, я мог бы сказать, что физический эксперимент, как правило, имеет целью не отыскание функции состояния физического объекта, а открытие характерных черт его гамильтониана (часто — его собственных значений), так как гамильтониан представляет собой природу системы, тот общий закон, который управляет ею в любом состоянии. Повторяю, вполне допустимо, что хорошим способом отыскания гамильтониана будет обращение схемы предсказания: вы многократно измеряете начальное и конечное состояния, а затем задаетесь вопросом, какой гамильтониан мог бы корректно соответствовать им. Если бы дело обстояло таким образом (как это имеет место в астрономии), квантовомеханическая теория измерения была бы совершенно верна. Но это не так. Тот факт, что при известном гамильтониане возможны только вероятные состояния, делает обратную задачу исключительно трудной. С этим согласится каждый, кто знаком с математической стороной дела. Нет ничего удивительного в том, что экспериментаторы следуют этим путем весьма неохотно. Наиболее интересные проблемы связаны с дискретными собственными значениями определенной физической переменной (чаще всего — энергии) или какого-нибудь матричного элемента (чаще всего — энергии возмущения). Эти проблемы

решаются иногда путем создания подходящих экспериментальных условий, но никогда не исследуется индивидуальная система на всем протяжении траектории ее состояний, потому что это невозможно. Ряд кратких наблюдений, проведенных над сходными системами, совмещается в одно и принимается в качестве виртуальной формы потенциальной истории одной и той же системы.

Последнее замечание относится, главным образом, к исследованию следов траектории индивидуальной частицы и происходящих с ней событий (например, ядерного распада) в камере Вильсона или на фотографической пластинке. В этих экспериментах мы находимся в том же самом положении, что и астрономы, если учесть, что мы не способны влиять на событие. Все же и здесь ситуация не до такой степени плоха, так как мы задаем среду, в которой происходит событие (природа и давление газа или состав фотографической эмульсии). Можно также приложить магнитное поле известной напряженности, которое, искривляя траектории частиц, дает тем самым ценную информацию.

8. Заключение

Некоторые имеют обыкновение отвечать на выдвинутые здесь возражения так, что мол они носят философский характер и не имеют существенного отношения ни к одной проблеме, с которой физика реально имеет дело. Подобное отношение служит примером того факта, что ученые склонны принимать собственное воззрение за естественный способ рассматривать вещи, тогда как воззрения других в той мере, в какой они отличаются от их собственного, по их мнению, извращены предвзятыми и неоправданными философскими догмами, от которых должна быть свободна беспристрастная наука.

Смышленный новичок в квантовой механике задает множество вопросов, но, по мнению знатоков, о которых идет речь, его надо отвлекать от таких вопросов. Он, например, спрашивает, являются ли квантовые переходы в атоме, сопровождаемые излучением светового кванта, мгновенными или же они занимают определенное время и проходят через промежуточные состояния. Ему отвечают, что эта проблема не имеет смысла и не может быть решена. Смысл приписывается только величине энергии, если мы измеряем ее, а она (по определению) может быть только значением начального и конечного состояния, причем вероятность найти атом во втором состоянии скорее, чем в первом, растет со временем так, как предсказывает теория.

Другой пример. Наш блестящий ученик сам может открыть, что в соответствии с теоретическими предписаниями ничто не препятствует тому, чтобы измерить скорость частицы известным методом, который давно практикуется бегунами и полицией (при определении превышения скорости), а именно, фиксируя время, которое затратила частица для прохождения определенного интервала. И он будет озадачен, заметив, что нет ничего, что препятствовало бы обеспечить точность измерения, выходящую далеко за пределы границ, которые указывает принцип неопределенности. Ответ, который он получит, будет таков, что это, разумеется, верно, но в этом нет

ничего страшного, так как проблематичные данные относятся к прошлому моменту времени и не могут быть использованы для предсказания будущего.

Можно привести еще много таких примеров. Ответы интригующие: они представляются неуязвимыми, ибо кажется, что они основаны на простых и надежных началах, для которых избран здравый и трезвый критерий реальности. В соответствии с целями науки реальностью считается то, что есть результат наблюдения (или может быть результатом наблюдения). Но на самом деле это еще не все. Мы как бы принимаем следующее предположение: все, что является результатом наблюдения или может быть таковым, в точности совпадает с тем, что квантовой механике угодно было назвать наблюдаемым. Я пытался дать здесь понять, что это не так. И, на мой взгляд, это не мелкое затруднение философского толка; оно заставит нас придать новую форму концептуальной схеме квантовой механики.

ПРИЛОЖЕНИЕ

ИЗ ПЕРЕПИСКИ¹

ПЕРЕПИСКА ШРЕДИНГЕРА С ЛОРЕНЦЕМ

1. ЛОРЕНЦ — ШРЕДИНГЕРУ

Гарлем, 27 мая 1926 г.

Многоуважаемый господин коллега!

Наконец я взялся ответить на Ваше письмо и поблагодарить Вас за любезную присылку гранок Ваших трех сообщений, которые я все получил. Их чтение доставило мне истинное удовольствие. Конечно, еще не пришло время для окончательного суждения, и, как мне кажется, еще имеются трудности, на которых я сейчас остановлюсь. Но даже если кажется, что на этом пути не удастся прийти к удовлетворительному решению, все же следует восхищаться проникательностью Ваших соображений и надеяться, что Ваши усилия существенно помогут глубже проникнуть в эти загадочные явления.

Особенно мне понравился способ, которым Вы строите подходящие матрицы и показываете, что они удовлетворяют уравнениям движения. Этим устраняется мое сомнение, возникшее при ознакомлении с работами Гейзенберга, Борна и Иордана, а также и Паули; именно то, что я себе ясно не представлял, как можно дать решение уравнений движения, например, в случае атома водорода.

Этот вопрос прояснился мне благодаря Вашему тонкому замечанию, что операторы q и $\frac{\partial}{\partial q}$ могут или не могут меняться местами аналогично q и p в матричном исчислении. Все-таки удивительно, что можно удовлетворить уравнениям, в которых q и p обозначают первоначально координаты и импульсы, тем, что этим величинам придают совершенно иное значение, мало напоминающее координаты и количество движения. Если мне пришлось бы теперь выбирать между Вашей волновой механикой и матричной механикой, я предпочел бы первую из-за большей наглядности, пока речь идет о трех координатах x , y , z . Но при большем числе степеней свободы я уже не могу физически интерпретировать волны и колебания в q -пространстве и поэтому должен был бы предпочесть матричную механику. Но и в этом случае Ваши соображения имеют то преимущество, что они приближают нас к правильному решению уравнений. Проблема собственных значений в принципе одинакова для многомерного q -пространства и для трехмерного.

Имеется еще пункт, в котором Ваши соображения превосходят, кажется, матричную механику. Опыт учит нас, что есть случаи, когда атом в течение некоторого времени пребывает в стационарном состоянии, и часто мы имеем дело с вполне определенными переходами из такого состояния в другое.

¹ Briefe zur Wellenmechanik. Wien, 1963. См. также в кн.: Э. Шредингер. Новые пути в физике. М., «Наука», 1971, с. 193—243. Перевод А. Г. Баранова и В. П. Жукова. Примечания к этой переписке (кроме отмеченных звездочкой) принадлежат Пржибраму (K. Przibram), опубликовавшему ее. — *Прим. ред.*

Поэтому нам необходима возможность представления каждого отдельного стационарного состояния и его теоретического исследования. Но матрица — совокупность всех возможных переходов, и ее нельзя разложить. Наоборот, в Вашей теории состояния, соответствующие различным собственным значениям E , играют каждое свою собственную роль.

Теперь позвольте мне сделать некоторые замечания, в которых Вы, пожалуй, не найдете много нового.

1. В Вашем волновом уравнении (я ограничиваюсь атомом водорода)

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2m}{h^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0 \quad (1)$$

E — постоянная, независимая от координат; существует столько волновых задач, сколько существует значений E ; при этом здесь рассматриваются, в частности, собственные значения E , ибо только они могут удовлетворить граничным условиям.

Ваше вычисление собственных значений * показывает, что под E понимается энергия электрона, в том смысле, что энергия равна нулю, когда электрон с нулевой скоростью находится на бесконечности от ядра. Иначе говоря, $E + e^2/r$ в любой точке x, y, z — это та кинетическая энергия, которую имел бы электрон при данном E , если бы он находился в этой точке. Этой кинетической энергии соответствует скорость

$$u = \sqrt{\frac{2}{m} \left(E + \frac{e^2}{r} \right)}. \quad (2)$$

2. Так как уравнение (1) не содержит производной по времени, то из него можно вывести лишь длину волны в определенной точке; величина

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{1}{h} \sqrt{2m \left(E + \frac{e^2}{r} \right)} \quad (3)$$

меняется от точки к точке.

Скорость распространения w волн и связанную с ней соотношением

$$w = \nu \lambda \quad (4)$$

частоту ν нельзя вывести из (1). Здесь остается известный произвол.

Но здесь действует одна основная мысль Вашей теории (притом очень красивая), что скорость u электрона должна быть равной «групповой скорости». Это требует выполнения соотношения

$$\frac{1}{u} = \frac{d}{d\nu} \left(\frac{\nu}{w} \right); \quad (5)$$

если учесть это соотношение, то удастся также определить ν и w .

* Очень хорошо, что Вы сумели провести это вычисление и притом получили значения соответствующие формуле Бальмера.

В отношении (5) нужно заметить, что, во-первых, мы считаем ν , w и u все положительными и, во-вторых, в определенной точке λ , u (и w), как это вытекает из (2) и (3), могут изменяться в зависимости от ν , так как эти величины как-то связаны с E . Однако при дифференцировании по ν в (5) мы должны оставить собственные значения E . Кажется, ничто этому не противоречит. Можно вполне представить себе состояния (бегущие волны), удовлетворяющие волновым уравнениям, но не всяким граничным условиям.

Из (4) и (5) следует

$$\frac{1}{u} = \frac{d}{d\nu} \left(\frac{1}{\lambda} \right).$$

Следовательно,

$$\sqrt{\frac{m}{2\left(E + \frac{e^2}{r}\right)}} = \frac{1}{h} \frac{d}{d\nu} \sqrt{2m\left(E + \frac{e^2}{r}\right)},$$

$$\nu = \frac{1}{h} \left(E + \frac{e^2}{r} + \text{const} \right).$$

Поскольку const означает независимость от E , то можно для const выбрать $E_0 - e^2/r$, где E_0 не зависит не только от E , но также от x, y, z . Итак,

$$\nu = \frac{1}{h} (E_0 + E). \quad (6)$$

Этим удовлетворяется условие, что частота сохраняется во всех точках поля. Далее, из (3) и (4)* следует

$$w = \frac{E_0 + E}{\sqrt{2m\left(E + \frac{e^2}{r}\right)}}. \quad (7)$$

3. Ваше предположение, что преобразование, которое должна претерпеть наша динамика, подобно переходу от лучевой оптики к волновой, звучит очень заманчиво, но у меня все же есть сомнения.

Если я Вас правильно понял, то «частица», например электрон, сравнима с «волновым пакетом», движущимся с групповой скоростью.

* Если $E_0 + E$ отрицательное, то можно положить $\nu = -\frac{1}{h} (E_0 + E)$,

$w = -\frac{E_0 + E}{\sqrt{2m\left(E + \frac{e^2}{r}\right)}}$ (оба положительные); тогда (5) удовлетворяется через

$u = -\sqrt{\frac{2}{m}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)}$ (отрицательное). В этом случае скорость распространения волн w и групповая скорость u имели бы противоположные направления.

Но волновой пакет никогда не может долго ограничиваться малым пространством. Малейшая дисперсия среды растянет его в направлении распространения, и, кроме дисперсии, этот пакет также будет все больше расширяться в поперечном направлении (дифракция). Из-за этого неизбежного размазывания, мне кажется, волновой пакет малоприспособлен для представления вещей, которым мы приписываем, до известной степени, длительное обособленное существование.

Как Вы сами отмечаете, в поле атома водорода размазывание, о котором идет речь, продвинулось далеко. Волновой пакет может несколько дольше сохраняться лишь тогда, когда его размеры велики по сравнению с длиной волны. Но определенная согласно (3) длина волны сравнима по порядку величины с боровскими эллиптическими траекториями, поэтому не может быть речи о волновом пакете, малом по сравнению с размерами такого эллипса и движущимся вдоль этой линии.

Вы можете, конечно, придавая постоянной E в (6) и (2) высокое положительное значение (можно думать о $E = mc^2$), получить сколь угодно большие частоты ν и соответствующие большие скорости распространения w^* , однако Вы не можете изменить длину волны, определенную уравнением (3).

4. Если мы решимся растворить, так сказать, электрон и заменить его системой волн, то это даст и неудобство и преимущество.

Неудобство, весьма существенное, в следующем: то, что мы приписываем электрону атома водорода, мы должны также приписывать всем электронам всех атомов; мы должны их всех заменить системами волн. Но как понять явления фотоэлектричества и испускания электронов раскаленными металлами? Здесь частицы проявляются совершенно ясно и целостно. Как могут они, растворившись, вновь сосредоточиться?

Я не хочу этим сказать, что не могут иметь места многие превращения внутри атома. Если хотят себе представить, что электроны не являются маленькими планетами, вращающимися вокруг ядра, и если удастся таким представлением чего-то достигнуть, то я ничего не имею против. Но когда изображают электрон как волновой пакет, то тем самым закрывают путь к его восстановлению. Слишком много требовать, чтобы волновой пакет, однажды распавшись, вновь собрался.

Преимущество, о котором я говорил, заключается в следующем: если электрон, вращающийся по окружности или эллипсу, существует как частица, то нужно ожидать, что в волновом уравнении (1) (имея в виду точку, в которой в данный момент электрон не находится), должен фигурировать не только член e^2/r , зависящий лишь от поля ядра, но и аналогичный член,

* Если положить $E = mc^2$ и, согласно обычной формуле $m = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^2 R}$ (R — радиус электрона), обозначить через E энергию на круговой боровской траектории радиуса r , так что

$$E = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{r}, \quad \text{то} \quad w = c \left[\sqrt{\frac{2}{3} \frac{r}{R}} - \sqrt{\frac{3}{8} \frac{R}{r}} \right].$$

Так как $r \gg R$, то $w \gg c$. Конечно, это ничему не противоречит, ибо здесь речь идет об отличном от обычного распространении электромагнитных волн.

относящийся к электрическому полю электрона. Одно поле стоит другого и они одинакового порядка величины. Но при таком изменении уравнения (1) исчисление собственных значений E стало бы несостоятельным и возникли бы невыразимые осложнения. Если же нет электрона, как такового, то легче согласиться с тем, что в уравнении фигурирует лишь член, представляющий заряд ядра.

5. Заменим теперь стационарные состояния Бора с энергиями E_1, E_2 и т. д. «стационарными волновыми системами» с частотами

$$\nu_1 = \frac{1}{h} (E_0 + E_1), \quad \nu_2 = \frac{1}{h} (E_0 + E_2) \quad \text{и т. д.} \quad (8)$$

Придавая большое положительное значение члену E , Вы можете достигнуть таких высоких основных частот, что они никаким образом не могут быть замечены. (Вы можете также предположить, что они не способны излучать, т. е. что нет взаимодействия между полем, в котором находятся соответствующие волновые системы, и обычным электромагнитным полем, хотя оба поля заполняют одно и то же пространство.) Наблюдаемые излучения имеют частоты

$$\nu_i - \nu_k = \frac{1}{h} (E_i - E_k),$$

и возникает вопрос, как это можно объяснить. Вы предлагаете здесь два способа: биений и комбинационных тонов.

О первом мало что можно сказать. Предположим, что фундаментальные уравнения, из которых выводится волновое уравнение (1), известны. Я имею в виду первоначальные «уравнения движения», не содержащие E , а содержащие частные производные по времени. Даже если фундаментальные уравнения линейны, суперпозиция двух решений $\psi_1 = a_1 \cos(2\pi\nu_1 t + b_1)$ и $\psi_2 = a_2 \cos(2\pi\nu_2 t + b_2)$ приводит к биениям. Однако ни один прибор (резонатор, решетка), в котором все происходит согласно линейным уравнениям, не среагирует на эти биения так, как на колебания с частотой $\nu_1 - \nu_2$. Все же, поскольку явление пока не ясно, можно предполагать, что каким-то образом возникают колебания (и излучения) с периодом, соответствующим частоте максимумов амплитуды.

Несколько легче объяснить возникновение комбинационных токов. Для этого необходима нелинейность фундаментальных условий, но это условие и достаточное. Если, например, фундаментальное уравнение содержит член с ψ^2 и одновременно происходят колебания с ψ_1 и ψ_2 , то получается член с

$$2\psi_1\psi_2 = a_1a_2 \cos[2\pi(\nu_1 - \nu_2)t + b_1 - b_2] + a_1a_2 \cos[2\pi(\nu_1 + \nu_2)t + b_1 + b_2], \quad (9)$$

где первое слагаемое как раз представляет разностный тон. Правда, для того чтобы совершенно четко уяснить себе, как он приводит к излучению, нужно дать еще себе отчет о характере взаимодействия этих колебательных систем с электромагнитным полем. Что касается суммарного тока в (9), то можно предположить, что он не наблюдается из-за его высокой частоты.

Кроме того, при комбинационных колебаниях можно довольно хорошо понять и поглощение, что значительно труднее, если сводить световые явления к биениям.

Пусть в атоме уже имеется первое состояние колебаний $\psi_1 = a_1 \cos(2\pi\nu_1 t + b_1)$ и действует сила (падающий свет) с частотой $\nu_2 - \nu_1$. Последняя может возбудить колебания $\psi' = a' \cos[2\pi(\nu_2 - \nu_1)t + b']$ (хотя и не посредством силового резонанса). Вследствие этого в члене ψ^2 фундаментального уравнения получится величина

$$2\psi_1\psi' = a_1 a' \cos[2\pi\nu_2 t + b_1 + b'] + a_1 a' \cos[2\pi(2\nu_1 - \nu_2)t + b_1 + b']$$

и можно рассматривать обе части, из которых она состоит, как выражение некоторых сил, возбуждающих колебания с частотами ν_2 и $2\nu_1 - \nu_2$. Первая из них, частота которой совпадает со вторым собственным колебанием, может перевести систему в колебание (с частотой этого собственного колебания), на что, в конечном счете, затрачивается часть энергии падающего света. Сила с частотой $2\nu_1 - \nu_2$ не оказывает воздействия, так как не соответствует какому-либо собственному колебанию системы.

Конечно, можно попытаться привести и дальнейшие соображения такого порядка.

Мне не совсем нравится в этих представлениях излучения как результат комбинационных колебаний то, что излучение трактуется как нечто побочное, происходящее от тех членов фундаментальных уравнений, которыми в первом приближении (при выводе волнового уравнения (1)) даже пренебрегают.

Не гораздо ли проще держаться стационарных состояний Бора и допустить наличие планковского вибратора с частотой $\nu_2 - \nu_1$ (в такой вибратор мог бы превратиться атом), и, наконец, что этот вибратор воспринимает при квантовом скачке $2 \rightarrow 1$ энергию $h(\nu_2 - \nu_1)$, а затем спокойно излучает ее?

6. Может быть, следует добавить, что мой земляк В. А. Иулиус¹ много лет тому назад (когда еще не были известны спектральные законы) заметил, что в богатых линиями спектрах имеются многие пары линий, для которых $\Delta\nu$ почти одинаковы.

Расчет по теории вероятностей (аналогичный тому, который служит для доказательства, что двойные звезды не являются кажущимся из-за случайного приближения) показал ему, что число разниц $\Delta\nu$, меньших определенного значения ϵ , намного больше того, что можно было бы ожидать по законам случая. После того как он показал этим реальность равенств $\Delta\nu = \Delta'\nu = \Delta''\nu = \dots$, он пришел к мысли, что многие спектральные линии могут быть результатом комбинационных тонов.

Позднее Рэлей однажды высказал замечание, что появление в спектральных формулах первой степени частот (в то время, как законы динамики

¹ Виктор Август Иулиус — с 1896 г. профессор теоретической механики и математической физики в Утрехте; умер в 1902 г.

скорее приводят к ν^2) должно, может быть, рассматриваться как указание на кинематические отношения.

После всех этих усилий я воспринял как настоящее упрощение показ Бором того, что всякая частота излучения связана с определенной разницей энергии, с помощью чего общая структура спектральных формул сразу разъясняется.

Таким образом, я до некоторой степени потерял интерес к объяснениям на основе комбинационных колебаний; однако этот интерес может воскреснуть, если в остальном Ваша теория хорошо оправдывается.

7. Действительную трудность в теории комбинационных колебаний я нахожу, однако, в энергетических соотношениях. Для энергий стационарных волновых систем можно прежде всего принять любые значения, произвольно манипулируя амплитудами, даже принимая уравнение (6) для частот. Все же, заменяя стационарные состояния Бора стационарными волновыми системами, целесообразно предположить, что между последними имеются определенные разницы энергии. Тот факт, что требуются определенные значения энергии (при столкновении электрона), чтобы вызвать некоторые явления излучения, явно показывает, что «уровни энергии» действительно существуют, и если мы отказываемся от электронов, движущихся по орбитам, то мы должны искать эти значения энергий в отдельных стационарных волновых системах. Наиболее просто будет приписать им значения

$$E_0 + E_1, E_0 + E_2, E_0 + E_3 \text{ и т. д.} \quad (10)$$

Здесь $E_1, E_2, E_3, \dots$ — боровские значения энергии (или собственные значения в волновом уравнении); при этом E_0 отождествляется с E_0 в (6) или, если предпочитают, считается отличным от него. Во всяком случае, имеется достаточное основание прибавлять к боровским значениям энергии величину E_0 , одинаковую для всех волновых систем и притом положительную. Значения E_1, E_2, E_3 и т. д. отрицательные, и естественно представлять себе энергию волновой системы как величину положительную.

Если теперь предположить, что волновые системы могут иметь только энергии (10) (т. е. иметь лишь определенные амплитуды), то возникает одно затруднение.

Пусть состояние 1 «естественное», т. е. в нем пребывает атом, предоставленный самому себе, и оно соответствует наиболее низкому энергетическому уровню; представим себе, как может возникнуть излучение с частотой $\nu_3 - \nu_2 = \frac{1}{h}(E_3 - E_2)$. Согласно Бору, мы должны сначала возбудить атом до энергетического уровня 3, для чего сообщить ему энергию $E_3 - E_1$ (например, через электронное столкновение). Это соответствует измерениям. Но, по новой теории, мы должны осуществить оба состояния 2 и 3, ибо требуемое излучение предполагает наличие одновременно обоих состояний. Таким образом, энергия должна быть $E_0 + E_2 + E_0 + E_3$, в то время как первоначально она равнялась $E_0 + E_1$. Если предположить, что при столкновении состояние 1 исчезает и остаются лишь состояния 2 и 3, то сообщенная энергия должна быть $E_0 + E_2 + E_3 - E_1$, что трудно согласовать с наблюдениями.

Конечно, можно обойти это затруднение, приняв, что отдельные состояния колебаний не обязаны иметь приведенные в (10) энергии, но тогда где же уровни энергии?

Далее, согласно Бору, при переходе $3 \rightarrow 2$ излучается энергия $E_3 - E_2$; состояние движения 3 исчезает и заменяется состоянием 2. Можно ли себе представить, что излучение, обусловленное разностью частот колебаний, испускает точно так же энергию $E_3 - E_2$? И что происходит тогда с энергиями обеих волновых систем? Аналогичные вопросы, на которых я не останавливаюсь более подробно, возникают при рассмотрении обратного процесса — поглощения.

В заключение я хотел бы сказать: в теории Бора можно считать неудовлетворительным то, что излучаемые частоты отличаются от частот действительно существующих периодических движений. В Вашей теории изящно то, что обе частоты приводятся в значительно более простую связь (именно $\nu_{\text{изл}} = \nu_2 - \nu_1$, где ν_1 и ν_2 — «внутренние частоты»). Тем не менее нелегко понять эту связь.

Мне будет очень приятно, если Вы мне как-нибудь напишете, что Вы об этом думаете. Попутно, прошу Вас извинить меня, если я не во всем правильно понял Ваши мысли.

С дружеским приветом и глубоким уважением преданный Вам

Г. А. Лоренц

2. ШРЕДИНГЕР — ЛОРЕНЦУ

Цюрих, 6 июня 1926 г.

Многоуважаемый господин профессор Лоренц

Вы оказали мне чрезвычайную честь, подвергнув мои последние работы глубокому анализу и критике на одиннадцати мелко исписанных страницах. Я не нахожу слов, чтобы поблагодарить Вас как следует за этот бесценный подарок. Меня очень тяготит, что этим я занял у Вас так неподобающе много времени. Моя благодарность выразится в том, что я собираюсь продолжать злоупотреблять Вашим временем, однако лишь для чтения, поскольку Вы мне разрешили сообщить Вам мою точку зрения на чрезвычайно интересные и важные аспекты, изложенные в Вашем письме. Разрешите мне не отвечать пункт за пунктом на отдельные мысли или сомнения. Вы сами, пожалуй, написали их больше по памяти, чем по порядку. Да и многое из того, что я могу сказать, относится к разным местам Вашего письма.

1. Вы упоминаете о трудности проектировать волны в q -пространстве с числом координат более трех на трехмерное обычное пространство и их там интерпретировать физически. Я сам долго чувствовал эту трудность, но полагаю, что теперь ее преодолел. Я думаю (и написал об этом в конце третьей работы), что физическое значение имеет не сама величина, а лишь квадратичная функция ее. Я выбрал там вещественную часть $\psi\bar{\psi}$, где ψ , понятно, комплексная (см. критику ниже) и поперечная черта означает комплексно-

сопряженную. Я хочу теперь выбрать $\psi\bar{\psi}$ проще, как квадрат абсолютного значения ψ . Если речь идет о системе N точечных масс, то $\psi\bar{\psi}$, как и само ψ , является функцией $3N$ переменных, или, сказал бы я, N трехмерных пространств $R_1, R_2, \dots, R_N$. Нужно отождествлять, во-первых, R_1 с действительным пространством и интегрировать $\psi\bar{\psi}$ по $R_2, \dots, R_N$; во-вторых, отождествлять с действительным пространством R_2 и интегрировать по $R_1, R_3, \dots, R_N$ и т. д. Затем сложить отдельные N результатов, предварительно умножив их на определенные постоянные, характеризующие точечные массы (по прежней теории. . . их заряды). Результат я принимаю за плотность заряда в действительном пространстве. Для атома с несколькими электронами получается как раз то, что Борн, Гейзенберг и Иордан называют вероятностью перехода, в новом и интересном понятии «компоненты электрического момента» (в сущности того частного момента, который осциллирует с соответствующей частотой излучения).

Неприятно — против этого даже следует возражать — применение комплексных чисел. ψ — все-таки реальная функция, и я должен был бы в уравнении (35) моей третьей работы

$$\psi = \sum_k c_k u_R(x) \cdot e^{\frac{2\pi i E_k t}{h_1}} \quad (35)$$

вместо мнимой степени числа e написать красиво и храбро косинус, спросив себя: можно ли доопределить однозначно мнимую часть, не обращая внимания на весь временной ход величины, а лишь на саму реальную величину и ее временную и пространственные частные производные в данном месте?

В самом деле, это возможно, во всяком случае для ψ . Краткости ради я пишу для «волнового уравнения»

$$L[u] + Eu = 0, \quad (1)$$

понимая под $L[]$ некий дифференциальный оператор. Далее, пусть ψ_r обозначает реальную колебательную функцию, единственную известную сначала, т. е. вещественную часть ψ , к которой надо доопределять мнимую часть. Это можно сделать так:

$$\psi = \psi_r - \frac{2\pi i}{h} L[\psi_r]. \quad (2)$$

Таким образом, во всяком случае, значение ψ независимо от комплексного представления определяется пространственными и временными частными производными реальной величины ψ_r , так что не возникает затруднения, когда имеется ψ_r , не соответствующее стационарной суперпозиции собственных колебаний. Правда, мы имеем теперь ψ и интегрирование по времени внесло бы неопределенную, чисто мнимую, функцию координат. Я пока не знаю, можно ли определить последнюю разумным образом. Но на практике ничто не мешает в приведенном ранее обсуждении заменить везде ψ через ψ_r , ибо в действительности все собственные значения имеют приблизительно оди-

наковую величину из-за большого добавочного постоянного члена, который они содержат и о котором Вы тоже говорите. Определив эту постоянную как mc^2 , что почти неизбежно (или как кратное от него), мы получим, что разницы между собственными значениями очень малы по сравнению с самими собственными значениями (порядка релятивистской поправки).

2. Вы не раз касаетесь того, что «волновое уравнение» (1) еще не есть фундаментальное уравнение проблемы, потому что оно уже не содержит частных производных по времени, а содержит взамен лишь постоянную интегрирования E . Уравнение применимо также не вообще, а лишь для таких решений, которые зависят от времени через множитель []¹. Последнее равносильно

$$\ddot{u} = - \frac{4\pi^2}{h} E^2 u.$$

Из (1) и (2) можно исключить E и получить

$$LL[u] + \frac{h^2}{4\pi^2} \ddot{u} = 0. \quad (3)$$

Это можно считать общим волновым уравнением, не содержащим более постоянную интегрирования E , но зато содержащим частные производные по времени. Оно имеет вид уравнения колебания пластинки (в котором фигурирует удвоенный оператор Лапласа), а не более простой вид колеблющейся мембраны. Мне потребовалось ужасно много времени, чтобы сообразить эту простую вещь. Можно теперь, конечно, из (3) вернуться назад через пробный подход

$$u \sim e^{\frac{2\pi i E t}{h}}$$

и пробное разложение (3) по схеме

$$(L[] - E)(L[] + E)u = 0,$$

$$L[u] - Eu = 0 \quad \text{или} \quad L[u] + Eu = 0,$$

как для колеблющейся пластинки. То, что таким образом получают все решения, должно быть доказано задним числом исследованием полноты найденной системы функций.

(То, что получается два уравнения с разными знаками при E , не имеет значения, ибо E — неизвестная постоянная, требующая определения, так что не получается добавочных, новых решений.)

3. Я позволил себе переслать Вам в приложении копию небольшой заметки, в которой проводится кое-что, прежде всего для простого случая осциллятора, что является также настоящим постулатом для всех слож-

¹ Зависимость от времени имеет вид синусоидального колебания; но так как не удалось установить, в какой форме этот множитель был записан в оригинале, скобки оставлены открытыми.

ных случаев, но встречается там большие трудности вычислительного характера. (Самое лучшее было бы, если бы оказалось возможным провести это в общем случае, но пока что это безнадежно.) Речь идет о действительном создании групп волн (или волновых пакетов), способствующих переходу к макроскопической механике при переходе к большим квантовым числам. Вы увидите из текста этой заметки, написанной до получения Вашего письма, сколько беспокойства создавало и мне «сохранение» этих волновых пакетов.

Я очень рад, что удалось показать хотя бы на простом примере, где это соблюдается, вопреки всем разумным предположениям.

Я надеюсь, что это имеет место для всех случаев, в которых обычная механика говорит о квазипериодических движениях.

Если мы считаем это обеспеченным или допустимым, то все же еще остается затруднение с проблемой свободного электрона в пространстве, совершенно свободном от поля.

Будете ли Вы считать возражение против теории весьма веским, если окажется, что в пространстве, совершенно лишенном поля, электрон не может существовать? Или, может быть, что вообще «свободные» электроны, в обычном смысле слова, не могут долго сохранять свою индивидуальность? Разговор об отдельных электронах в пучке катодных лучей имеет, возможно, лишь следующий смысл: пучок имеет некоторую «зернистую» структуру, точно так, как это вероятно для света во многих явлениях, причем в обоих случаях ни волновое, ни корпускулярное описание не являются исчерпывающими, а требуется некоторое промежуточное, создать которое адекватно нам пока не удалось.

4. Я хотел бы еще связать некоторые замечания с приложенной заметкой, из которых наиболее важным мне кажется следующее: не следует проводить параллель между отдельными собственными колебаниями волновой теории и отдельными стационарными орбитами теории Бора. Если провести такую параллель, то соответствующий переход от микромеханики к макромеханике становится абсолютно невозможным. Как видно, для высоких квантовых чисел ($A \gg 1$) отдельная боровская орбита состоит из суперпозиции большого числа относительно близких собственных колебаний. Могло бы оказаться, что между амплитудами и фазами близких собственных колебаний существуют принудительные связи, например, такие, что, придавая A все возможные положительные значения, мы получили бы все возможные состояния осциллятора. (Нужно еще помнить, что весь многочлен

умножен на $e^{-A^2/2}$, дабы интеграл $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi \bar{\psi} dx$ стал независимым от A .)

В предельном случае очень малого A получается лишь основное колебание, с увеличением A постепенно возбуждаются обертоны, и центр тяжести передвигается медленно ко все более высоким порядковым числам.

Но это пока что измышления, может быть, все обстоит совершенно иначе. Ни в коем случае я не считаю правильным говорить об энергии отдельных собственных колебаний, измеренной квадратом амплитуды. Последний, по моему мнению, не имеет ничего общего с энергией, а относится к заряду.

Единственное свойство отдельных собственных колебаний, имеющее отношение к энергии, — это, я полагаю, их частота.

Естественно возникает вопрос: почему для того, чтобы возбудить определенное собственное колебание, я должен подвести к атому определенную порцию энергии? Здесь «определенную порцию энергии» означает в действительности либо «бомбардировать электронами определенной скорости», либо «облучать светом определенной частоты». Что касается последнего, то Вы лучше меня знаете, как широко раскрыл бы рот и глаза физик старой школы, если бы ему сказали: облучать светом определенной частоты «означает» подвести определенную порцию энергии. Он искал бы в резонансе гораздо более простое объяснение.

Обоснование для указанного выше утверждения, столь трудное для понимания физиков старой школы, видят в том факте, что свет определенной частоты способен регулярно вызывать те же физические явления, что и электроны определенной скорости. Но из этой эквивалентности можно с той же убедительностью или с той же неубедительностью вывести обратное заключение: движущийся с определенной скоростью электрон должен быть волновым явлением с частотой того света, которому он эквивалентен, согласно опыту, в отношении возбуждения резонанса. Я считаю и то и другое заключение несколько односторонним; истина лежит где-то посередине.

5. Вы обсуждаете очень подробно, и для меня весьма поучительно, вопрос об объяснении излучения биениями или комбинационными тонами. Я должен честно сознаться, что до сих пор не имел ясного представления о разнице между двумя этими вещами. Я сразу настолько обрадовался тому, что удалось получить картину, где хоть что-то имеет действительно отношение к тем частотам, которые мы наблюдаем в излучаемом свете, что я с бьющимся сердцем затравленного беглеца набросился на это что-то в том виде, в котором оно представилось непосредственно, именно на амплитуды, изменяющиеся периодически с частотой биений. Этим я хотел лишь сказать, что мыслим такой механизм, посредством которого эти изменяющиеся амплитуды возбуждают свет той же частоты. Наоборот, дискретные частоты боровской модели казались мне, и сейчас кажутся (уже с 1914 г.), чем-то столь чудовищным, что я охарактеризовал бы возбуждение света таким путем, как немислимое. В альтернативе биения или комбинационные тоны; само собой разумеется, что я высказываюсь за последние. Это означает лишь то, что, ни в коем случае, не может все происходить строго линейно, ибо колебание с идеальной частотой оставалось бы вечно бездействующим.

6. Меня удивляет, что в одном месте Вашего письма Вы сильно шокированы тем, «что излучение трактуется как нечто побочное, происходящее от членов фундаментальных уравнений, которыми в первом приближении (при выводе волнового уравнения) даже пренебрегают». Если я Вас правильно понимаю, то должен заявить, что противоположное, если оно бы имело место, было бы для меня серьезным камнем преткновения. И это потому, что я полагаю, что для атомной динамики значение по порядку величины членов, относящихся к излучению, правильно отражено в старых теориях и, в первую очередь, не в боровской теории, а уже в электронной.

В обеих теориях члены, относящиеся к излучению, играют совершенно второстепенную роль. В электронной теории главная сила собственного поля, действующая на электрон, (это сила инерции). Сила излучения является вторым членом разложения в ряд и в обычно встречающихся движениях электронов всегда очень мала по сравнению с силой инерции. И в боровской модели вначале сила реакции излучения не учитывается и вся модель строится без нее. Лишь впоследствии она вводится двояким образом: во-первых, допущением некоторой нечеткости уровня (определенной как раз классической силой реакции излучения) и, во-вторых, «скачками электронов». Последние при их причудливой прерывности не допускают непосредственного сравнения по порядку величины с чем-нибудь другим. Но так как частота этих скачков вновь вычисляется «соответственно» реактивной силе излучения, видно, что она должна быть одного порядка с последней. Я очень доволен тем, что, по-видимому, волновая механика совпадает в этом пункте с прежними теориями, поскольку реакция излучения на излучающую систему достаточно ничтожна, чтобы в первом приближении пренебречь ею при составлении «уравнений движения».

Что включение этих членов неизбежно нарушает линейный характер уравнений движения, благодаря Вашим выкладкам стало для меня непреложной истиной, и я считаю это достижение чрезвычайно важным.

7. Из собственно волнового уравнения и правила для групповой скорости Вы обратным порядком вновь выводите для скорости волн выражение (6) из моего второго сообщения, служившего мне точкой отправления,

$$u = \frac{E + E_0}{\sqrt{2m(E - V)}}.$$

Формально постоянная E_0 у меня отсутствует, но я подчеркивал, что E и V порознь определены, разумеется, до аддитивной постоянной. Я также отмечал там с особой радостью то обстоятельство, что длина волны определяет порядок величины размеров траектории, при которых начинают проявляться квантовые явления.

Вы пишете далее, что из-за этой неизменно определенной длины волны размеры электрона, по крайней мере, того же порядка, как и эллиптические траектории Бора с малым порядковым числом, и что невозможно построить волновые пакеты, движущиеся по этим траекториям и малые по сравнению с их размерами. Не знаю, прав ли я, когда между строками читаю слово «к сожалению». Думаю, что приложенная заметка покажет Вам, что я никогда не лелеял этого желания для траекторий с малым квантовым числом. По моему мнению, эти состояния нечто отличное от траекторий электронов общего жанра (*toto genere*), и классическая механика вновь вступает в свои права, лишь начиная с больших квантовых чисел, точно так дифракционная картина щели постепенно превращается в тень, когда края щели медленно раздвигаются.

8. В заключение позволю себе отметить некоторые серьезные трудности принципиального характера (вне связи с Вашим письмом), которые мне

стали постепенно ясными впервые в связи с матричной механикой и в которых, не говоря уже о наглядности, я вижу преимущество волновой механики.

Прежде всего нужно упомянуть о симметризации функции Гамильтона. Я довольно обстоятельно остановился на этом в моей третьей работе (с. 14). Но я тогда еще не уяснил, что установленные для этого Борном, Иорданом и Гейзенбергом правила ошибочны как раз при применении их к обобщенным координатам; они правильны лишь для декартовых координат. Это просто эмпирически выявлялось в вычислениях Дирака и Паули; тогда выбирают такую симметризацию, которая приводит к чему-нибудь разумному. Поэтому Гейзенберг¹ решился в итоговой работе в «Математических анналах» установить, что гамильтониан нужно брать в декартовых координатах из классической теории. Но при этом не ясно, что он берет назад прежнее ошибочное обобщение (совместно с Борном и Иорданом в «Zeitschrift für Physik») на любые координаты. Кроме того, остаются случаи, как симметричный или несимметричный гироскоп, совершенно неопределенные, ибо в них возврат к декартовым координатам не только затруднен, но даже и невозможен, пока не сказано, как «жесткие связи» должны быть приложены в новой механике.

В противовес этому волновая механика непосредственно применима при любых координатах и позволяет вычислить уровни энергии, совершенно не нуждаясь в выяснении взаимосвязи обобщенных координат с декартовыми.

Второй пункт — это то, что волновая механика всегда, за исключением, может быть, одной аддитивной постоянной (что, между прочим, не важно для разностей энергии), дает совершенно определенные собственные значения.

По-видимому, в матричной механике это, по крайней мере, весьма трудно, и я не уверен, не остаются ли здесь, случайно, принципиальные неопределенности.

Дирак² и Венцель³ делают вычисления для атома водорода на многих страницах; Венцель делает даже релятивистские вычисления, и в окончательном результате нет того, что действительно может интересовать: именно, нужно ли квантовать «половинными числами» или «целыми»? Венцель находит, таким образом, как раз формулу Зоммерфельда для «тонкой структуры», но, по указанной причине, результат совершенно бесполезен в смысле экспериментальной проверки. В волновой механике релятивистская трактовка, столь же простая, как и классическая, дает однозначно половинные азимутальные и радиальные квантовые числа. (В свое время я не опубликовал эти вычисления, так как этот результат как раз показал мне, что еще чего-то недостает; это — что-то — конечно, идея Гаудсмита и Уленбека).

¹ W. Heisenberg. Math. Ann., 1926, 95, 683.

² P. A. M. Dirac. Proc. Roy. Soc., 1925, 109, 649; 1926, 110, 561.

³ G. Wentzell. Z. Phys., 1926, 37, 80.

* «Квантовые интегралы» содержат еще аддитивную постоянную, остающуюся неопределенной. Делается лишь заключение, что она будет прогрессировать по целым кратным h . Это серьезный недостаток, а не малозначительный, как аддитивная постоянная энергии.

Впрочем, заметим, что предположение Венцеля так выражено, что если довести его до конечного результата, он, вероятно, был бы ошибочным*, ибо он трактует задачу двухмерно, а не трехмерно. Это, как я подчеркивал раньше в своем втором сообщении, недопустимо; поскольку волновая механика полностью математически эквивалентна геттингенской механике, то наверняка это недопустимо и в последней. Волновая механика ясно показывает причину этого, ибо движение волны в двух измерениях нечто совершенно иное, чем движение волны в трех измерениях. Напротив, в геттингенской механике нельзя хорошо уяснить, насколько я понимаю, почему недопустимо сведение проблемы применением интеграла. По крайней мере причина не очень бросается в глаза, иначе этот прием не был бы общеупотребительным.

Боюсь, уважаемый профессор, что я опять отнял у Вас много времени этим длинным письмом. Но Ваша любезная, обстоятельная и, при всех сомнениях, доброжелательная критика вселяет в меня надежду, что та или иная из мыслей, вызванных ею, сможет Вас заинтересовать. Я совершенно убежден, что не смог рассеять всех Ваших сомнений, и, сказать правду, у меня самого их более чем достаточно, и во всех этих соображениях я вижу лишь первый бледный отблеск наступающего, надеюсь, более глубокого понимания.

Должен еще Вас поблагодарить за изумительный портрет, которым Вы вознаградили выразивших Вам свое уважение по случаю Вашего юбилея; с моей стороны это был, к сожалению, просто символический акт. Этот милый портрет будет всегда напоминать мне те счастливые дни, которые я провел два года тому назад в Брюсселе под Вашим руководством.

Прошу Вас быть всегда уверенным в моем искреннем восхищении и уважении.

Преданный Вам Э. Шредингер

3. ЛОРЕНЦ — ШРЕДИНГЕРУ

Гарлем, 19 июня 1926 г.

Многоуважаемый господин коллега!

Я с живым интересом прочитал Ваше последнее письмо, за которое очень благодарен. Оно во многом содействовало мне в понимании Ваших взглядов. Я вижу теперь, что затруднения, которые я испытывал, частично происходили от того, что я слишком привык к представлениям теперешней квантовой теории, чтобы сразу в достаточной степени освободиться от них. Так, например, я возражал против того, что излучение проявляется у Вас как нечто «второстепенное».

Вы совершенно правы, утверждая, что это имеет место и в классической теории, поскольку, например, член, соответствующий сопротивлению излучения в уравнении движения электрона, намного уступает другим членам, так что в первом приближении им часто можно пренебречь. Но при этом

* Т. е. не представлял бы действительного высказывания теории.

я имел в виду квантовый скачок $2 \rightarrow 1$, при котором (как мы вместе с Бором себе представляем) излучается определенная порция энергии $E_2 - E_1$ с частотой $\nu_{2,1} = \frac{E_2 - E_1}{h}$. Подобные переходы могут изредка иметь место, но при каждом отдельном квантовом скачке излучение как раз главное *.

Но если удастся провести Ваше представление (излучение комбинационного тона) и если при этом нет надобности думать об излучении именно порции энергии $E_2 - E_1$, то это меня удовлетворит.

В связи с этим мне также понравилось Ваше замечание о «способности возбудить излучение» движущегося электрона. Если удастся интерпретировать явления тем, что с движущимся электроном связывают определенную частоту так, что имеют дело с резонансом, то это намного изящнее.

Все же здесь возникает еще ряд вопросов. Допустим, мы имеем систему с основными колебаниями ν_1 и ν_2

$$\nu_1 = \frac{E_0 + E_1}{h_1}, \quad \nu_2 = \frac{E_0 + E_2}{h}, \quad (1)$$

где E_1 и E_2 — энергии (отрицательные), приписываемые атому в двух стационарных состояниях (по Бору), а E_0 — большое положительное значение. Можно себе представить, что под влиянием внешнего облучения с частотой $\nu_2 - \nu_1$ система побуждается к испусканию света с той же частотой («резонанс с комбинационным тоном»). Но как должен происходить резонанс с электроном? У Бройля (прямолинейно движущийся электрон) нужно делать различие между частотой внутри электрона и частотой волн, сопровождающих частицу, в ее движении вперед. Я хочу здесь придерживаться первой частоты, ибо в данном случае я не имею достаточно ясного представления о волнах.

Что же касается внутренней частоты, то при значении ν_0 для покоящегося электрона, по теории относительности, для электрона, движущегося со скоростью v , имеем

$$\nu_0 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \nu_0 - \nu_0 \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2}.$$

Трудно поступить иначе, чем положить $\nu_0 = mc^2/h$. Тогда имеем

$$\frac{mc^2 - \frac{1}{2}mv^2}{a}.$$

Согласно опыту теперь можно побудить электрон к излучению, когда

$$\frac{1}{2}mv^2 = E_2 - E_1,$$

* Чтобы некоторым образом представить себе этот процесс, я думал о вибраторе с частотой ν_2 , воспринимающем энергию $E_2 - E_1$ и затем спокойно ее излучающем; или же что атом, имеющий энергию E , время от времени превращается в вибратор ν_2 , который снова становится боровским атомом, когда его энергия уменьшается на E_2 из-за излучения.

так что последнее выражение становится

$$\frac{mc^2 + E_1 - E_2}{h} \quad (2)$$

Как может теперь система с основными колебаниями (1) прийти к резонансу так, что она излучает частоту $\nu_{2,1} = \frac{E_2 - E_1}{h}$ под влиянием действия с частотой (2)? Не видно, как это происходит, особенно, когда, что естественно, полагают $E_0 = mc^2$; дело еще усложняется тем, что электрон пролетает через электрон¹ и своими быстрыми колебаниями воздействует быстрее в различных точках поля колебаний, так что нужно было бы учесть нечто вроде доплер-эффекта.

Вы меня очень обрадовали присылкой Вашей заметки «Непрерывный переход от микромеханики к макромеханике»².

Первой моей мыслью по ее прочтении было: теория, которая опровергает возражение таким поразительным и изящным способом, должна быть на верном пути. К сожалению, моя радость вскоре омрачилась.

Я не вижу, как именно Вы сможете, в случае атома водорода, например, построить волновые пакеты, движущиеся как электроны (я имею здесь в виду очень высокие боровские орбиты). Вы не располагаете необходимыми для этого короткими волнами. Я уже коснулся этого вопроса в моем первом письме и хотел бы остановиться на этом подробнее. Но прежде я позволю себе сообщить Вам некоторые вычисления, к которым побудила меня Ваша заметка. Метод, которым я воспользовался, может быть, где-нибудь найдет применение.

Так как мы вряд ли можем пока надеяться на действительное осуществление волновых пакетов в сложных случаях, то я поставил перед собой вопрос: если мы примем, что существуют волновые группы, длительно ограниченные малым объемом, то можно ли доказать, что они будут двигаться в силовом поле точно так, как электрон? Конечно, это можно было бы сразу утверждать, если можно было бы перенести законы обычной оптики (световые лучи, групповая скорость) на данные явления. Но с этим переносом нужно быть осторожным. Как Вы замечаете, в оптике речь идет о непрерывном ряде частот, здесь же о дискретных частотах. Ваш результат уже показал, что в данном случае можно вывести нечто другое (более существенное, именно действительное совместное пребывание), чем упомянутые оптические законы.

Я испробовал метод сначала на линейном вибраторе и затем применял его к атому водорода...³

¹ «Электрон» здесь, по недосмотру, вместо «атом».

² E. Schrödinger. Naturwissenschaften, 1926, 14, 684.

³ Далее в письме на 12 страницах следует вычисление, результат которого показывает, что волновой пакет на высокой квантовой орбите атома водорода не может сохраняться и поэтому не может быть использован как модель электрона.

Поэтому, мне кажется, что при теперешнем состоянии Вашей теории Вы не можете построить волновые пакеты, представляющие электроны на высоких боровских орбитах. Мы не должны заимствовать из классической оптики хотя бы то, что волновой пакет должен содержать очень многие длины волн *.

В Вашем примере линейного осциллятора Вы имеете то преимущество, что располагали сколь угодно короткими волнами.

В Вашем письме Вы говорите, что некоторая квадратичная величина ϕ может означать электрическую плотность (а не энергию), причем Вы представляете себе электрон «размазанным». Я хотел бы спросить: если мы одну из величин, встречающихся в формулах, отождествляем с плотностью заряда, не было бы изящнее (и желательнее), если бы имели $\int \rho d\tau = \text{const}$? Это вряд ли может быть при $\rho = \phi\bar{\phi}$. Не естественнее ли принять за ρ одно из значений, которые я в предыдущем обозначил через ϵ и назвал энергией? В самом деле, $\int \epsilon d\tau = \text{const}$.

Второй вопрос: можете ли Вы различать положительный и отрицательный заряд?

Одна трудность, на которую я уже указывал, заключается в том, что встречающееся в формулах V (с членом $-e^2/r$) относится лишь к полю ядра; можно ли ограничиться его потенциалом, даже когда имеются отрицательные заряды, либо распространенные непрерывно в пространстве, либо сосредоточенные в электроне? Изменяя член e^2/r , рискуем потерять правильные собственные значения E .

Это все неясные вопросы. С другой стороны, отрадно то, что если Вы делаете ответственным за излучение $\phi\bar{\phi}$ (Вы можете то же самое достигнуть любой квадратной величиной), Вы тем самым выявляете комбинационные тоны и частоты излучения без дальнейших предположений (нелинейность уравнений).

В заключение я хотел бы, с Вашего позволения, резюмировать то, что следует сказать, мне кажется, о Вашей теории, поскольку ее можно развить и сохранить в силе, имея в виду в особенности атом водорода. При этом я опускаю пакеты энергии и не хочу касаться размазывания или растворения электрона.

1. В поле ядра могут существовать волновые колеблющиеся состояния, подчиняющиеся определенному уравнению движения. Установлены правила для их определения из уравнений движения электрона.

Фигурирующий в уравнении движения потенциал зависит от заряда ядра. Заряд электрона не имеет значения для этого потенциала.

2. Возможные состояния волн имеют определенные (очень высокие) частоты, определяемые с учетом граничных условий ($r=0$, $r=\infty$). В каждой

* Это можно также вывести из рассматриваемого здесь уравнения движения (аналог принципа Гюйгенса).

точке w и λ имеют определенное значение, зависящее от положения точки, но не зависящее от направления.

3. За излучение ответственна величина, квадратичная относительно ϕ . Это приводит, при одновременном существовании двух указанных состояний движений с частотами ν_1 и ν_2 , к излучаемой частоте $\nu_2 - \nu_1$ (и к частоте $\nu_2 + \nu_1$, очень высокой, которой можем [или хотим] пренебречь).

Во всем этом нет речи об электроны. Но он все же должен как-то участвовать в явлении; это видно уже из того, что при потере электрона спектр атома значительно меняется. Поэтому я добавлю еще следующее.

4. В каждом из упомянутых состояний колебаний имеются выделенные линии *, характеризующиеся тем, что при данных конечных точках

$$\delta \int \frac{ds}{w} = 0 \quad (32)$$

w представляет скорость распространения. Выделенные линии для n -го состояния суть как раз n -квантовые орбиты электрона в теории Бора.

Доказательство: можно заменить (32) через

$$\delta \int \frac{ds}{\lambda} = 0 \quad (33)$$

[Теперь для n -го состояния, которое мы рассматриваем, $E = E_n$ и в волновом уравнении

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0; \quad (34)$$

$E + e^2/r$ означает кинетическую энергию $\frac{1}{2}mv^2$, которую имел бы электрон с полной энергией E_n в рассматриваемой точке.

При вычислении λ из (34) получаем $\lambda \sim 1/v$ (с постоянным коэффициентом). Итак, (33) преобразуется так, что при предписанном E_n должно быть

$$\int v ds = 0.$$

Это как раз условие, определяющее движение электрона.

5. Одновременно видно, что выделенные линии замкнуты (эллипсы или окружности). Дальнейшее их свойство — то, что их длина, выраженная в длинах волны $\left(\text{я имею в виду } \int \frac{ds}{\lambda} \right)$, — целое число **.

Доказательство: из (34) следует для длины волны

$$\frac{4\pi^2}{\lambda^3} = \frac{2m}{H^2} \frac{1}{2} mv^2 = \frac{m^2 v^2}{H^2}, \quad \lambda = \frac{2\pi H}{mv} = \frac{h}{mv}.$$

* Я их называю так и не говорю о «световых лучах», ибо уже нет речи о физическом значении последних (граница широкого пучка).

** Мы можем говорить об этом, не думая о распространении волн.

Итак,

$$\int \frac{ds}{\lambda} = \frac{1}{h} \int m v ds = \frac{2}{h} \int T dt = \frac{2}{h} \Theta \bar{T},$$

где Θ — время одного оборота электрона на соответствующей орбите и $\bar{T}$ — осредненная по времени его кинетическая энергия. Но при движении по кеплеровому эллипсу имеет место закон

$$T = -E,$$

где E — энергия (в бесконечности потенциальная энергия равняется нулю).

Итак, мы должны вычислить

$$-\frac{2}{h} \Theta E_n$$

и можем сделать это для круговой орбиты, ибо для всех n -квантовых орбит, окружностей или эллипсов, время обращения одинаково. Для круговой орбиты радиуса r_n имеем

$$E_n = -\frac{e^2}{2r_n}, \quad \Theta = \frac{2\pi r_n}{v_n},$$

так что наше выражение превращается в

$$\frac{2\pi e^2}{h v_n}.$$

Итак, поскольку по известной формуле

$$v_n = \frac{2\pi e^2}{nh}, \quad \text{то} \quad \int \frac{ds}{\lambda} = n.$$

6. По какой-то причине * электрон может двигаться лишь по выделенной линии. При этом остается неясным, что будет с электроном при одновременном наличии двух состояний колебаний.

Как видите, последние высказывания близки к взглядам де Бройля. В сравнении с ним Вы достигли прогресса в том, что наглядно представили волновые состояния, и это важный шаг.

Однако если нам придется отказаться от волновых пакетов и вместе с ними от одной из основных идей Вашей теории преобразования классической механики в волновую, мы потеряем кое-что очень изящное. Меня бы очень обрадовало, если бы Вы смогли найти выход. Впрочем, я буду очень доволен, если удастся сделать для некоторых других случаев (релятивистские поправки, движение ядра, эффекты Штарка и Зеемана) то же, что сказано выше в пунктах 1—6 для спектра Бальмера.

С дружеским приветом и глубоким уважением

преданный Вам Г. А. Лоренц

* Трудно сказать, почему. Можно думать о представлении де Бройля; внутренние колебания электрона, совпадение фаз последних и фаз сопутствующей волны.

ПЕРЕПИСКА ШРЕДИНГЕРА С ПЛАНКОМ

1. ПЛАНК—ШРЕДИНГЕРУ

Берлин, Грюнвальд, 2 апреля 1926 г.

Уважаемый господин коллега!

Большое спасибо за отдельный оттиск. Читаю Вашу статью ¹ с тем же напряжением, с каким любопытный ребенок выслушивает развязку загадки, над которой он долго мучился, радуюсь красотам, раскрывающимся перед моими глазами. Но некоторые из них я должен еще изучить подробнее, чтобы понять полностью. К тому же исключительная роль функции действия w мне чрезвычайно нравится. С давних пор я убежден, что ее значение для физики далеко не исчерпано. Я хотел бы только устранить маленькую эстетическую ошибку. Старик Якоби, при всем интересе, несколько огорчился бы изменению его фамилии ². Можно ли это еще исправить?

Ваш Планк

2. ШРЕДИНГЕР — ПЛАНКУ

Цюрих, 8 апреля 1926 г.

Глубокоуважаемый господин тайный советник!

Вашей любезной открыткой Вы доставили мне неописуемую радость. Я чрезвычайно счастлив, что основная идея кажется Вам привлекательной, и я теперь надеюсь, что со временем удастся ее провести во всех направлениях, несмотря на все теперешние ее недостатки.

Очень стыдно мне за ужасное «k», и я немедленно написал об этом в типографию; надеюсь, что удастся еще исправить. Благодарю Вас много раз — черт знает, как я с железной последовательностью искажил это священное имя в пяти местах. Это для меня ужасно тягостно.

Благодарю покорно за дружескую присылку Вашего доклада ³, который я с большим интересом прочитал еще несколько дней тому назад. Особенно меня пленила драматическая мощь, с которой Вы в третьем разделе обрисовываете положение теории относительности и квантовой теории и без всяких формул выясняете и делаете понятной суть затруднений. Именно это энергетическое затруднение до сих пор, к сожалению, не преодолено.

Если не сразу ответил на Вашу открытку, которая меня так обрадовала, то потому, что хотел Вам сообщить хоть что-нибудь новое. Прилагаю вывод эффекта Штарка для H . Кажется, что интенсивности получаются совершенно правильно. В основу заложено предположение, что плотность электричества задана квадратом волновой функции и что для отдельных собственных коле-

¹ Речь идет о первой части статьи Шредингера «Квантование как задача о собственных значениях» (Ann. Physik, 1925, 79, 361—376).

² Шредингер написал ошибочно фамилию математика Якоби через k.

³ Речь идет о докладе Планка «Физическая закономерность...», прочитанном 14 февраля 1926 г. на академических курсах в Дюссельдорфе.

баний, относящихся к одному грубому уровню Бальмера, нормирующий интеграл имеет ту же самую величину.

Я пока не могу сказать наверняка, что сообщенные значения бесспорны, ибо расчеты весьма сложны, и я не проверил их еще раз. Во всяком случае формула расщепления Эпштейна получается без изменений (как я уже утверждал в конце «второго сообщения»), получается также и «принцип отбора для азимутального квантового числа». Далее совершенно автоматически получается «исключение экваториального нулевого квантового числа» — не существует собственных колебаний, соответствующих квантовым орбитам, сталкивающимся с ядром. Далее удовлетворяет то, что три ненаблюдаемые компоненты на относительных расстояниях 5, 6 и 8, хотя теоретически и не «запрошенные», получаются от 80 до 700 раз менее интенсивными, чем самые слабые из наблюдаемых, так что отсутствие в наблюдениях вполне понятно.

Я теперь вычисляю H_α , H_β , H_γ . К сожалению, вычисления страшно трудно обозриваемы и мне не удастся привести их к более простому виду.

С нижайшим поклоном и приветом, глубокоуважаемый господин тайный советник,

остаюсь Вам преданный Э. Шредингер

3. ПЛАНК — ШРЕДИНГЕРУ

Берлин, Грюнвальд, 24. V 1926 г.

Уважаемый господин коллега!

Я уже давно должен был Вас поблагодарить за дружескую присылку Вашей последней работы о квантовании. Вы можете себе представить, с каким интересом и воодушевлением я погрузился в изучение этого эпохального труда, хотя сейчас я очень медленно продвигаюсь вперед в этом своеобразном ходе мыслей. Я очень надеюсь на влияние некоторой привычки, облегчающей со временем пользование новыми понятиями и представлениями, что я уже часто испытывал. Но, что меня сейчас особенно радует и почему я сейчас Вам пишу, — это радостная надежда, что мы скоро здесь, может быть, получим возможность послушать Вас и поговорить с Вами. Как мне рассказал коллега Грюнейзен¹, не отказались от приглашения Вас на одно из заседаний физического общества, а лишь несколько отложили его и, возможно, оно состоится еще в этом семестре. Позвольте и мне Вам выразить, как все мы, физики, были бы рады услышать изложение Вашей новой теории и получить впечатление о Ваших идеях от Вас самих. И не бойтесь, что мы отнимем у Вас слишком много времени и Вас утомим. Я не знаю, знаком ли Вам уже Берлин, но я надеюсь, Вы найдете, что здесь живут в некотором отношении свободнее и независимее, чем в маленьком городе, где каждый следит за другим и нет возможности даже уединиться так, чтобы никто этого не заметил.

¹ Грюнейзен был тогда председателем Берлинского окружного отделения Немецкого физического общества.

Хотел бы высказать маленькую эгоистичную просьбу. В случае, если Вы можете приехать в июле, прошу не раньше 11-го. В начале июля я должен поехать в Бонн прочесть несколько лекций, и буду опечален, если из-за этого пропущу Ваш приезд. Но прежде всего желаю Вам отдыха, в котором Вы нуждаетесь после напряженной работы, и полного восстановления Ваших сил.

Буду особенно благодарен, если при случае Вы мне открыткой сообщите Ваши планы на поездку.

Пока, с сердечным приветом.

Преданный Вам М. Планк

4. ШРЕДИНГЕР — ПЛАНКУ

Цюрих, 31 мая 1926 г.

Глубокоуважаемый господин тайный советник!

Сердечно благодарю за Ваше благожелательное и благосклонное письмо от 24-го, которое меня окончательно настроило принять любезное приглашение, во всяком случае еще в этом семестре, если все пойдет так и дальше. Я немедленно написал господину Грюнейзену. Само собою разумеется, что не следует говорить, по крайней мере я так полагаю, о времени, когда Вас не будет в Берлине. Господин Грюнейзен был столь любезен, что наметнул на возможность небольшого переноса заседания, и так как, по его мнению, перенос заседания с 9 июля подошел бы слишком близко к концу семестра, я позволил себе предложить перенос заседания с 25 июня на 2 июля. Выйдет ли это с Вашей поездкой в Бонн? 25 июня не подходит мне потому, что с 21 по 26 здесь будут находиться для докладов и дискуссий ряд иностранных физиков (среди них Зоммерфельд, Ланжевен, Паули, П. Вейс). Сообщение так неудобно, что мне пришлось бы самое позднее выехать после обеда 23-го, если не хочу непосредственно перед 25-м провести ночь в поезде. Я этого не хочу, ибо очень устал бы и, возможно, очень скверно докладывал бы.

Буду очень благодарен Вам, господин тайный советник, если Вы кратко посоветуете мне, как построить свой доклад. Я имею в виду, должен ли я больше думать о присутствии в аудитории Вас, Эйнштейна и Лауэ — мысль о чем и без того подавляет меня — или ориентироваться на слушателей, далеко стоящих от теоретической работы; неизбежным следствием будет тогда скука для названных выше (и многих других). Иначе говоря: должен ли я сделать упрощенный обзор того, что уже опубликовано, или, упомянув его вкратце, говорить больше о теории возмущений, об эффекте Штарка и обобщенных формулах интенсивности.

(В противном случае я мог бы упомянуть о последнем лишь вкратце в конце, иначе это было бы слишком длинно; как я убедился на здешних коллоквиумах, сжатый, ориентирующий обзор основных положений, без многих вычислений, продолжается примерно час.)

Конечно, я могу сделать два доклада: один в общем заседании, другой в более узком коллоквиуме — если это удастся.

Я получил сегодня очень любезное и очень интересное письмо от Г. А. Лоренца на 13 мелко исписанных страницах, которое я, конечно, должен сперва хорошо изучить. Он поднимает кучу интересных вопросов. В общем он настроен очень критически, но никоим образом не отрицательно. Лоренц видит одну из главных трудностей преобразования классической механики в «волновую механику» в том, что «волновой пакет», который должен заменить «точку изображения» классической механики в макроскопических задачах (например, при движении электрона по слабоискривленной траектории), не может остаться сконцентрированным, а должен согласно общим законам волновой теории постепенно расширяться на большие пространства из-за «дифракции». Я и раньше это тяжело переживал, но, кажется, как ни странно, это не имеет места, во всяком случае, не всегда. Для гармонического осциллятора — он остается наиболее простым и типичным примером механической системы, с которым так легко и удобно оперировать, — я смог построить группу волн суперпозицией большого числа близких собственных колебаний высокого порядкового (квантового) числа, группу, которая, ограниченная практически в малой области, точно бежит по гармоническому эллипсу классической механики, и к тому же сколь угодно долго, не рассеиваясь. Я думаю, что сделать то же для электрона в атоме водорода лишь вопрос вычислительного мастерства. Тогда будет ясен переход от микроскопических собственных колебаний к макроскопическим «орбитам» классической механики и можно будет сделать ценные выводы о фазовых взаимодействиях соседних колебаний. Эти фазовые и амплитудные взаимодействия остаются пока что постулатом. Взаимодействия могут, конечно, быть так устроены, что для больших квантовых чисел не получится «циркулирующая» материальная точка, например, ввиду линейности группировки могут также получиться две независимые циркулирующие волновые группы. Может быть, уравнения лишь приблизительно линейны.

Второй очень неясный вопрос, затронутый Лоренцем, это энергия, которую нужно приписать собственному колебанию. Очевидно, энергию Бальмера—Бора нельзя приписать собственному колебанию. Вообще не нужно рассматривать отдельные собственные колебания как эквивалент отдельных боровских орбит. Как видно из приведенного выше построения, это неправильная аналогия. Понятие «энергия» — это нечто, что мы восприняли из макроскопического опыта и лишь из него. Я не думаю, что можно непосредственно перенести это понятие в микромеханику и говорить об энергии отдельного частного колебания. Энергетическое свойство отдельного частного колебания — это частота. Его амплитуда должна определяться совершенно иным образом, полагаю через нормировку интеграла квадрата общего возбуждения к величине заряда электрона.

Господин Грюнейзен был столь любезен, что обнадежил меня, что либо Вы, либо господин фон Лауэ предоставите мне гостеприимный приют. Если это не вызовет слишком много хлопот, буду, конечно, очень рад и горячо благодарю за Ваше доброе предложение. Я постараюсь создать возможно меньше

неудобств и прошу это устроить с наименее возможным нарушением уклада жизни. Любое импровизированное пристанище для меня совершенно достаточно.

Благодарю Вас еще раз за все дружелюбие ко мне, исходящее вообще из Берлина, и особенно от Вас, господин тайный советник.

С искренним уважением

преданный Вам Э. Шредингер

5. ПЛАНК — ШРЕДИНГЕРУ

Берлин, Грюнвальд, 4 июня 1926 г.

Дорогой уважаемый господин коллега!

Меня весьма радует, что Вы решились посетить Берлин еще в этом семестре, и я точно знаю, что и остальные физики думают так же.

Как мне сообщил коллега Грюнейзен, он имеет некоторые сомнения относительно 2 июля и предлагает 16 июля. Я к этому присоединился бы. Семестр продолжается здесь до начала августа, так что в середине июля все идет еще полным ходом, и мы не должны бояться отъезда многих. Сам Грюнейзен составляет, правда, исключение, но он должен столь рано уехать, что все равно, к сожалению, пропустит Ваш приезд. Но нас остальных 16 июля вполне устраивает, и вопрос только в том, подходит ли эта дата для Вас самих. Особое удовольствие для меня и жены составит Ваше согласие остановиться у нас. Мы очень надеемся, что сможем устроить Вас уютно в нашем доме. Я прежде всего позабочусь, чтобы Вы остались в максимально возможной степени свободным в своем поведении и в особенности, за исключением «официальных» часов, посвященных физическому обществу, имели бы возможность уединиться и заняться, чем хотите. Я знаю по собственному опыту, как подобная возможность подчас приятна. Впрочем, мой дом в Вашем распоряжении днем и ночью столь долго, сколько Вам заблагорассудится.

Вы спрашиваете также об уровне, на котором лучше всего Вам сделать доклад, или, вернее, на какую аудиторию он должен быть рассчитан. Я мог бы Вам предложить, в согласии с моими коллегами, представить себе в качестве слушателей студентов старших семестров, следовательно, уже занимавшихся механикой и геометрической оптикой, но еще не продвинувшихся в более высокие области, которым дифференциальные уравнения Гамильтона—Якоби, если они их вообще знают, никоим образом не представляются само собой разумеющимися, а представляются трудным, достойным уважения достижением углубленного исследования. Ни в малейшей степени не бойтесь, что кто-нибудь из нас найдет какое-либо из Ваших высказываний лишним. Даже если это высказывание не будет необходимым нам для понимания Вашего хода мыслей, все же представит особый интерес посмотреть, какими особыми путями шествует Ваша мысль и какие формы Вы предпочитаете для своей точки зрения. Главным в Вашем докладе для всех нас будет то, что Вы сами в Вашем ценном письме обозначали как общий ориентирующий обзор основных положений без многих вычислений и частных проблем.

Может быть, Вам будет легче и проще это сделать, если на другой день, в субботу 17 июля утром, Вы сделаете в нашем коллоквиуме второй доклад с упором на более специальные темы, с дополнениями и дальнейшей разработкой мыслей, обрисованных в общем заседании. Так как Вы сами намекнули на подобную возможность, то надеюсь, что Вам это покажется целесообразным. Это легко можно устроить, и я лишь прошу Вас сообщить мне свое согласие, чтобы мы могли это организовать.

Какой перекрестный огонь критических, восторженных и требующих разъяснений откликов может обрушиться на Вас! Это же чудесная перспектива.

Вы, как я вижу, энергично уже занялись важным вопросом, может ли, и при каких условиях, сохраниться волновой пакет. У меня предчувствие, что для замкнутой системы это обеспечивают граничные условия, тогда как для безграничного пространства удовлетворительное решение кажется возможным лишь на основе новых допущений. Но это *cura posterior*¹.

Пока сердечный привет и дружески прошу написать мне, в какой день и час Вас встречать здесь.

Преданный Вам Планк

6. ШРЕДИНГЕР — ПЛАНКУ

Цюрих, 11 июня 1926 г.

Глубокоуважаемый господин тайный советник!

Прошу не сердиться на меня за то, что лишь сегодня отвечаю на Ваше столь благосклонное письмо от 4 июня. Между тем я написал господину Грюнейзену о моем окончательном согласии на 16 июля. Это меня вполне устраивает, так как мне придется закончить свои лекции лишь на пару дней раньше. Впрочем, эти последние лекции не имеют большого значения, так как головы студентов уже заняты каникулами. Меня огорчает, что я не встречаюсь с самим господином Грюнейзеном и не познакомлюсь с ним, но, к сожалению, тут ничего не изменишь.

Прежде всего, сердечное спасибо за Ваше любезное приглашение остановиться у Вас. Я его, конечно, принимаю с тысячей благодарностей. В том, что Вы предлагаете свой дом как «убежище от Берлина», проявляется безграничная, заботливая доброта, поистине меня тронувшая. Вы совершенно правы в том, что часто как раз этой возможности остаться на час-другой наедине больше всего недостает, когда все вокруг стараются сделать приятное. Но в данном случае я надеюсь, что мне не потребуется пользоваться этой возможностью слишком долго, несмотря на усталость после семестра. Я не только хотел бы дать господам в Берлине, столь любезно интересующимся моей работой, все, что смогу, как в «официальные часы», так и вне их, но и с эгоистической точки зрения я хотел бы интенсивно использовать удобный

¹ Запоздалое сожаление (лат.).

случай обсудить с рядом выдающихся исследователей самых различных направлений вопросы, увлекавшие меня в течение многих месяцев. Если при этом немного устанешь за несколько дней, то удовольствие от интересного обмена мнениями — достаточное вознаграждение, чтобы не обращать внимание на возбуждение и напряжение.

При общем докладе я буду придерживаться Ваших советов, за которые очень Вам благодарен, и буду, конечно, весьма рад, если кто-нибудь захочет на следующий день послушать меня в более тесном кругу.

В последние дни с моего сердца словно сняли тяжелый камень: я получил взаимодействие атома с падающей световой волной, т. е. теорию дисперсии.

Я изрядно опасался, что при вынужденных колебаниях собственные колебания сами проявятся как точки резонанса и, кроме того, что вынужденные колебания не будут зависеть от рядом существующих собственных колебаний, т. е. состояния, в котором находится атом. Это было бы бессмыслицей. Однако все решается неслыханно просто и изящно, все происходит как раз так, как должно быть, само собою и непринужденно. Суть заключается в следующем: то, что до сих пор я называл «волновым уравнением», не есть истинное волновое уравнение, а уравнение амплитуды. Оно (уравнение (18) второго сообщения) не содержит более время, а вместо него содержит постоянную интегри-

рования E . Временная зависимость должна задаваться через $\psi \sim PR \left(e^{\pm \frac{2\pi i E t}{h}} \right)$, или, что то же самое, должно иметь место

$$\frac{d^2\psi}{dt^2} = -\frac{4\pi^2 E^2}{h^2} \psi.$$

Из этого уравнения и уравнения (18) можно исключить E и так получить истинное волновое уравнение четвертой степени, аналогичное уравнению колеблющейся пластинки.

Теперь главное: в этом правильном волновом уравнении потенциальная энергия должна непринужденно быть также определенной функцией времени. Таким образом, энергию взаимодействия с падающей волной можно добавить как возмущающий член, и отсюда провести расчет возмущения, что очень просто. Существенной частью результата является так называемая дисперсионная формула Крамерса с вполне точными данными о фазе и поляризации вторичного излучения — конечно, предполагая, что собственные функции и собственные значения невозмущенного атома известны. Чего не хватает еще общей картине — это лишь взаимодействия с собственной волной, т. е. того, что соответствует затуханию излучения. Я думаю, что это не должно составить большого затруднения.

Можно, конечно, применить теорию возмущений и ко многим другим задачам, например к возмущению пролетающей α -частицей или электроном. Я полагаю, что это значительный шаг вперед, ибо теперь можно, хотя бы в принципе, точно проследить весь временной ход процесса.

Я мог бы, если это Вас устраивает, приехать в Берлин вечером 15 июля, если поезд не приходит слишком поздно. Я должен сначала рассмотреть различные многочисленные возможности и позволю себе еще известить Вас

определенно. Пока что еще раз тепло благодарю Вас и Вашу глубокоуважаемую супругу за Вашу большую доброту. Прошу только Вас, не причиняйте себе хлопот! Чем меньше я причиню Вам неудобств, тем более буду рад.

С искренней преданностью, глубокоуважаемый господин тайный советник
Ваш Э. Шредингер

7. ПЛАНК—ШРЕДИНГЕРУ

Грюнвальд, 15.VI 1926 г.

Дорогой господин коллега!

Большое спасибо за Ваше письмо от 11-го, сообщившее нам Ваше желанное согласие. Кроме того, оно опять содержит сообщения, радующие любого физика-теоретика. Но об этом мы еще поговорим устно, надо еще расспросить о многом, ибо аппетит приходит во время еды. Только не переутомляйтесь. Итак, я ожидаю весть о часе Вашего приезда 15 июля. Чем раньше, тем лучше. 16-го будет Ваш доклад в физическом обществе ¹ и 17-го в нашем коллоквиуме. Вечером 17-го надеюсь принять у себя с Вами некоторых коллег. На всякий случай напоминаю, что с 5 по 11 июля я буду в Бонне. Но адрес мой остается обычным.

С сердечным приветом Ваш Планк

8. ШРЕДИНГЕР — ПЛАНКУ

Цюрих, 4 июля 1927 г.

Глубокоуважаемый господин тайный советник!

Позвольте мне еще немного поговорить о физике. Я так хотел бы знать, как судят в Берлине и в особенности Вы сами о состоянии дел в квантовой теории. Верно ли то, как говорят физики — сторонники матриц и q -чисел, что волновое уравнение описывает лишь поведение статистической совокупности, аналогично тому, как это делает так называемое дифференциальное уравнение в частных производных Фоккера? Я охотно этому бы поверил, ибо это представление действительно намного более удобно, если бы я только мог успокоить свою совесть тем, что не столь уж легкомысленно так просто отделяться от трудностей. Думаю, что я прав в том, что сами Вы, в свое время лишь после тяжелой мысленной борьбы выдвинули первое основополагающее предположение о дискретности, т. е. «квантовую теорию», — это совершенно ясно вытекает из того, что Вы долгое время преследовали «второй вариант». Мне думается, что при вновь возникших теперь точках зрения необходимо снова возобновить эту борьбу с той же серьезностью. У меня нет чувства, что именно так поступают те, кто уже сегодня решительно утверждает: нужно придерживаться дискретного обмена энергии.

¹ Доклад Шредингера в Берлине, прочитанный 16 июля 1926 г. на заседании под председательством В. Чернста, назывался «Основы атомистики, базирующейся на волновой теории».

В вероятностных представлениях Борна самое подозрительное для меня то, что при ближайшем их проведении (сторонниками этих взглядов), естественно, получаются удивительные вещи: вероятности событий, казавшихся независимыми наивному представлению, при их наложении не просто перемножаются, а «интерферируют амплитуды вероятности» совершенно таинственным образом (конечно, именно так, как мои амплитуды волн). В одной самой свежей работе Гейзенберга даже мои, столь осмеянные волновые пакеты, наконец, нашли соответствующую трактовку как «пакеты вероятности». Это особенно комично. Это можно выразить и так: вероятность Борна (точнее: квадратный корень из нее) — двухмерный вектор, и сложение должно проводиться векториально. Полагаю, что умножение еще сложнее.

Засим, по божьей воле, умолкаю. Если, действительно, нужно, постараюсь привыкнуть и к таким вещам.

Целую руку Вашей глубокоуважаемой супруге и остаюсь, высокоуважаемый господин тайный советник,

искренне Вам преданный Э. Шредингер

ПЕРЕПИСКА ШРЕДИНГЕРА С ЭЙНШТЕЙНОМ

1. ЭЙНШТЕЙН — ШРЕДИНГЕРУ

16 апреля 1926 г.

Дорогой коллега!

Господин Планк, с оправданным восторгом, показал мне Вашу теорию, которую я также стал изучать с огромным интересом. При этом у меня возникло одно сомнение, которое, надеюсь, Вы сможете рассеять. Если я имею две системы, никак не связанные между собой, и E_1 — квантово возможный уровень энергии первой системы, а E_2 — такой же уровень второй системы, то $E_1 + E_2 = E$ должен быть таким же уровнем для совокупной системы, состоящей из них обеих. Однако я не вижу, каким образом Ваше уравнение

$$\operatorname{divgrad} \varphi + \frac{E^2}{b^2(E - \Phi)} \varphi = 0$$

выражало бы это свойство.

Чтобы Вы поняли, что я имею в виду, пишу другое уравнение, удовлетворяющее этому условию,

$$\operatorname{divgrad} \varphi + \frac{E - \Phi}{b^2} \varphi = 0.$$

Ибо оба уравнения

$$\operatorname{divgrad} \varphi_1 + \frac{E_1 - \Phi_1}{b^2} \varphi_2 = 0$$

(действительное для фазового пространства 1-й системы),

$$\operatorname{divgrad} \varphi_2 + \frac{E_2 - \Phi_2}{b^2} \varphi_2 = 0$$

(действительное для фазового пространства 2-й системы) имеют следствием

$$\operatorname{divgrad}(\varphi_1 \varphi_2) + \frac{(E_1 + E_2) - (\Phi_1 + \Phi_2)}{b^2} \varphi_1 \varphi_2 = 0$$

(действительное в совокупном q -пространстве).

Для доказательства нужно лишь умножить уравнения на φ_2 и, соответственно, на φ_1 и сложить. Таким образом, $\varphi_1 \varphi_2$ — решение уравнения для совокупной системы, отвечающее уровню энергии $E_1 + E_2$.

Я тщетно старался получить подобное отношение для Вашего уравнения.

Мне кажется также, что уравнение должно быть так составлено, чтобы в нем не фигурировала постоянная интегрирования энергии. Этому условию удовлетворяет составленное мною уравнение, без чего я не смог бы приписать ему физический смысл. Я над этим еще недостаточно поразмыслил.

Приветствует Вас сердечно

Ваш А. Эйнштейн

Замысел Вашей работы свидетельствует о подлинной гениальности¹.

2. ЭЙНШТЕЙН — ШРЕДИНГЕРУ

22 апреля 1926 г.

Дорогой коллега!

Я только что усмотрел в Вашей первой работе, что Вы в основу Вашего рассмотрения действительно поставили уравнение

$$\operatorname{divgrad} \psi + \operatorname{const} (E - \Phi) \psi = 0,$$

которое соответствует теореме сложения для независимых систем. Итак, мое письмо было излишним.

Я не вижу особой разницы между Вашей теоретической работой о газах и моей², ибо у Вас состояние (одинаковой вероятности) характеризуется совокупностью чисел $n_1, n_2, n_3, \dots$, причем числа n_1, n_2 и т. д. имеют то же значение, что у меня.

Я не понимаю в Вашем изложении, как Вы могли бы использовать последнюю формулу в (4), так как она несовместима с условием

$$\sum n_i = \operatorname{const}.$$

С сердечным приветом

Ваш А. Эйнштейн

¹ Эта фраза написана на поле письма; очевидно, она была добавлена после его окончания.

² До этого была переписка о молекулярной статистике.

3. ШРЕДИНГЕР — ЭЙНШТЕЙНУ

Цюрих, 23 апреля 1926 г.

Глубокоуважаемый профессор!

Благодарю Вас сердечно за Ваше в высшей степени любезное письмо от 16-го. Ваше и Планка одобрение больше значат для меня, чем одобрение пол-света. Впрочем, все это дело не возникло бы ни теперь, ни когда-либо позже (я имею в виду свое участие), если бы Вы в Вашей второй статье о квантовой теории газов ¹ не щелкнули меня по носу, указав на важность идей де Бройля.

Возражение в Вашем последнем письме меня еще больше обрадовало. Оно основывается на ошибке памяти. На самом деле, у меня нет уравнения

$$\operatorname{divgrad}\psi + \frac{E^2}{b^2(E - \Phi)}\psi = 0,$$

мое уравнение в действительности выглядит точно так, как Вы вывели непосредственно из двух условий «аддитивности» квантовых уровней и независимости от абсолютного значения энергии

$$\operatorname{divgrad}\psi + 8\pi^2 \frac{E - \Phi}{b^2}\psi = 0.$$

Итак, Ваши фундаментальные условия — выполнены. Впрочем, я очень признателен Вам за эту ошибку памяти, ибо благодаря Вашему замечанию важное свойство формального аппарата впервые дошло до моего сознания.

Кроме того, доверие к какой-либо формуле всегда возрастает, когда кто-нибудь, а в особенности Вы, ее же вновь получаете исходя из нескольких фундаментальных соображений.

На днях я с огромным интересом прочитал в «Naturwissenschaften» Ваше предложение нового опыта относительно когерентности ². Но я еще не кончил его обмозговывание. Это всегда продолжается у меня весьма долго. Я не совсем понимаю, как Вы мыслите устройство за решеткой («Свет, прошедший через решетки, собирается другой линзой в параллельный пучок...»).

Я представляю себе, что проволоочная решетка находится в фокусе этой линзы, а далее находится интерферометр типа Фабри—Перо (плоскопараллельный воздушный слой, кольца равного наклона). Обычно в таком случае говорят: каждой точке источника соответствует точка кольца. Источником служит решетка. Тогда свет от различных щелей решетки вообще не интерферировал бы. Но здесь, по классической теории, особый случай, когда отдельные точки источника колеблются когерентно по определенному закону. Я еще не уяснил себе, как это действует. Но, может быть, мое представление об этом устройстве нелепо.

Очень забавило меня Ваше очаровательное объяснение образования меандров ³. Случайно несколько дней тому назад моя жена расспрашивала меня

¹ А. Einstein. Berl. Ber. 1924, 1, 3. (См. в кн.: А. Эйнштейн. Собр. науч. трудов, т. 3. М., «Наука», с. 489).

² А. Einstein. Naturwissenschaften, 1926, 14, 300. (См. в кн.: А. Эйнштейн. Собр. науч. трудов, т. 3, с. 514—516).

³ См.: А. Einstein. Naturwissenschaften, 1926, 14, 222. (См. в кн.: А. Эйнштейн. Собр. науч. трудов, т. 4, с. 4—77).

о «феномене чашки чая»¹, но я не сумел дать разумного объяснения. Она говорит, что теперь никогда не сможет помешивать чай, не вспомнив о Вас. Сердечно Вас приветствует, глубокоуважаемый профессор,

искренне преданный Вам Э. Шредингер

4. ЭЙНШТЕЙН — ШРЕДИНГЕРУ

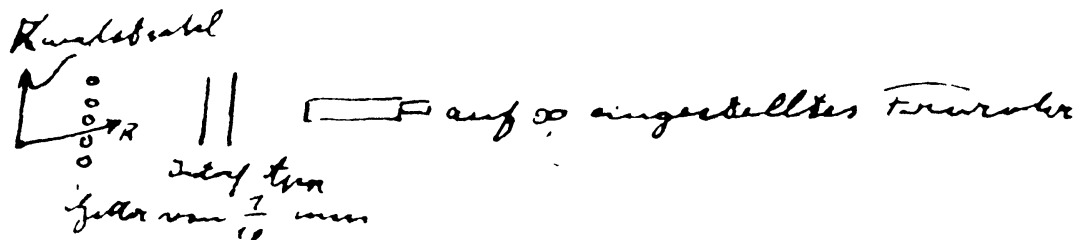
26 апреля 1926 г.

Дорогой коллега!

Большое спасибо за Ваше письмо. Я убежден, что Вашей формулировкой условий квантования Вы добились решающего успеха. Я также убежден, что путь, избранный Гейзенбергом и Борном, уводит в сторону.

У них это самое условие аддитивности не выполняется. Я теперь нашел соображения, почти исключающие возможность существования сферической волны, так что я почти убежден, что предложенный мною опыт дает отрицательный результат.

Его наиболее простая принципиальная схема — следующая:



Направлению R излучения соответствует точка в фокальной плоскости зрительной трубы. Лучи, излученные атомом в направлении R , попадают или не попадают (попеременно) в зрительную трубу. При подходящем отношении между скоростью атомов и разностью хода интерференция должна исчезнуть, чему не верю.

Мешающим образом действует дифракция на решетке, но этого недостаточно, чтобы нарушить доказательность эксперимента.

С дружеским приветом

Ваш А. Эйнштейн

¹ Речь идет о легко проверяемом факте, что чайники на дне чашки при помешивании собираются в середине.

5. ШРЕДИНГЕР — ЭЙНШТЕЙНУ

Берлин, Грюнвальд,
Кюноштрассе, 3 мая 1928 г.

Глубокоуважаемый профессор Эйнштейн!

Прилагаю письмо Нильса Бора¹, выразившего в конце его пожелание, чтобы Вы и Планк ознакомились с его содержанием. Я прилагаю также копию моего письма, чтобы Вы уяснили себе, чем вызвана дискуссия. Замечание о соотношении неопределенности в идеальном газе в уточненном виде гласит: если мы квантуем молекулу, которая на отрезке длиной l постоянно отражается, то имеем $\oint p dx = p \oint dx = 2lp = nh$; это значит: $p_n = nh/2l$. Близкие квантовые значения импульса поэтому столь мало отличаются (именно лишь на $h/2l$), что даже при максимальной неопределенности координаты ($\Delta x = l$) мы не можем получить точное значение импульса, позволяющее различить два близких квантовых состояния. То, что говорит Бор об этом случае в конце третьей страницы, мне совершенно непонятно*.

Если Вам удобно, я с удовольствием как-нибудь пришел бы к Вам поговорить об этом письме, но, может быть, Вы теперь перед отъездом не располагаете временем и Вам нужно спокойствие?

С сердечным приветом и поклонами всей семье.

Ваш Шредингер

6. ЭЙНШТЕЙН — ШРЕДИНГЕРУ

31 мая 1928 г.

Дорогой Шредингер!

Я думаю, что Вы попали в самую точку. Увертка с произвольно большой областью периодических переменных для сужения Δp , правда, очень остроумна. Однако представляется, что такое толкование соотношения неопреде-

¹ В письме Н. Бору от 13 мая 1926 г. Шредингер благодарил за отдельный оттиск статьи Бора «Das Quantenpostulat und die neuere Entwicklung der Atomistik» (Naturwissenschaften, 1928, 16, 245). (См. в кн.: Н. Бор. Собр. науч. трудов. Т. 2. М., «Наука», 1971, с. 30—53). Он обращает внимание на то, что при известных условиях принцип неопределенности Гейзенберга не позволяет различать близкие квантовые состояния и в качестве примера приводит сопряженные величины угловых переменных и действия, а также движение молекулы в идеальном газе. Он усматривает в этом ограничение применимости старых эмпирических понятий, которые должны быть заменены новым комплексом понятий без ограничения, что, во всяком случае, должно быть весьма трудным.

Бор возражал в письме от 25 мая 1928 г., что он не видит причины для отказа от старых понятий и что все трудности снимаются принципом дополненности. Замечание об угловой переменной он считает несостоятельным, так как при интерпретации экспериментов с помощью понятия стационарных состояний всегда имеют дело со свойствами атомной системы, обусловленными фазовыми отношениями большого числа следующих друг за другом периодов. Он не понимает, что такое применение принципа неопределенности к молекуле в газе, ибо здесь сопряженный с координатой импульс неоднозначен.

* Все здесь высказанное ужасающе тривиально!

ленности мало что разъясняет. Пример задуман для свободной частицы и применим непринужденно лишь для этого случая. Ваше требование об отказе от понятий p , q , ибо только так можно понять «качание», мне представляется вполне оправданным. Философия успокоения Гейзенберга—Бора ¹ — или религия? — так тонко придумана, что предоставляет верующему до поры до времени мягкую подушку, с которой не так легко спугнуть его. Пусть спит.

На меня эта религия действует столь мало, что вопреки всему я говорю: не E и ν , а E или ν ; и притом: не ν , а E (в конечном счете реально). Но математически я не могу в этом разобраться. Моя голова и так слишком забита. Если Вы хотите меня обрадовать Вашим посещением, это будет славно с Вашей стороны и очень приятно для меня.

С сердечным приветом Ваш А. Эйнштейн

7. ШРЕДИНГЕР — ЭЙНШТЕЙНУ

Ла Пань (Бельгия), 7, Сантье де Лапен

19 июля 1939 г.

Дорогой Эйнштейн!

Одна голландская газета пару месяцев тому назад поместила сравнительно разумно звучащий репортаж, будто ты добился чего-то важного в объединении гравитации и волн материи. Это меня страшно интересует, ибо я уже давно думаю, что следует отождествлять ψ -волны с волнами нарушения гравитационного потенциала — конечно, не с теми, которые ты исследовал впервые, но с теми, которые обладают действительной массой, т. е. не исчезающим T_{ik} . Это значит, я думаю, что нужно в абстрактной общей теории относительности, содержащей T_{ik} еще как «*asylum ignorantia*» ² (по твоему собственному выражению), ввести материю не в качестве массивных точек или чего-нибудь подобного, а как квантованные гравитационные волны. Я много над этим думал, но мало чего достиг, кроме того, что обнаружил, что в книге Эддингтона «Proton und Elektron», ранее очаровавшей меня, § 13.7 ошибочен.

К сожалению, не очень трудно найти в этой умной книге серьезные ошибки.

Жаль, что пришлось заполнить это письмо многими личными делами, писать о таких вещах ужасно трудно.

Если это письмо застанет тебя в твоей парусной лодке, то желаю тебе хорошего отдыха и удовольствия. Я сам на этом приятном бельгийском берегу в компании по-детски веселых людей чувствую себя необыкновенно хорошо.

¹ О дискуссиях между Эйнштейном и Бором см. в кн.: Н. Бор. Собр. науч. трудов. Т. 2, М., «Наука», 1971, с. 399—433. — *Прим. ред.*

² Убежище невежества (*лат.*).

Если бы только можно было быть легкомысленным и меньше думать о том, что может произойти. Каникулы — хорошая вещь, но каникулы, которым не видно никакого ясного конца, странная штука.

С сердечным приветом

преданный тебе Э. Шредингер

8. ЭЙНШТЕЙН — ШРЕДИНГЕРУ

Пеконик ¹, 9.VIII 1938 г.

Дорогой Шредингер!

Теперь о физике. Как прежде, так и теперь я убежден, что волновое представление материи не есть полное представление положения вещей, хотя оно и оказалось практически полезным. Очень красиво это показывает твой пример с кошкой ² (радиоактивный распад, связанный со взрывом). Одни части функции ψ соответствуют живой кошке, а другие — распыленной кошке, в одно и то же время.

Если пытаться воспринимать ψ -функцию как полное описание состояния (независимо от наблюдения), то это означает, что в данный момент кошка не жива и не распылена. Но это или другое состояние осуществлялось бы наблюдением. Если же отбросить такое представление, то нужно считать, что ψ -функция представляет не истинное положение вещей, а совокупность нашего знания о положении вещей. Это интерпретация Борна, разделяемая сегодня большинством теоретиков. Тогда формулируемые законы относятся не к изменениям во времени существующего, а к изменениям во времени совокупности наших обоснованных ожиданий.

Обе точки зрения логически безупречны. Но я не могу верить, что одна из них в конце концов будет доказана.

¹ Мыс Пеконик, США.

² Остроумный мысленный эксперимент с «размазанной кошкой» описан в статье Шредингера о современном состоянии квантовой теории в «Naturwissenschaften» (1935, 23, 812). Приводим соответствующее место: «Можно построить и совсем шутовские примеры. Посадим кошку в стальной сейф вместе с адской машиной (защищенной от кошки). В счетчик Гейгера положена крупинка радиоактивного вещества, столь малая, что за час может распасться один из атомов, но с той же вероятностью может не распасться ни один. Если атом распадается, то счетчик через реле приведет в действие молоточек, который разобьет колбу с синильной кислотой. Предоставив эту систему самой себе в течение часа, мы скажем, что кошка еще жива, если за это время не распался ни один атом. Первый же распад привел бы к отравлению кошки. ψ -функция всей системы выразила бы это тем, что живая и мертвая кошка (с позволения сказать) смешаны или размазаны в одинаковых пропорциях.

В этих примерах типично то, что неопределенность, ограниченность первоначально атомными размерами, превращается в макроскопическую неопределенность, которая поддается разрешению прямым наблюдением. Это препятствует нам выдавать в такой наивной форме «размытую модель» за отображение действительности. Сама по себе она не содержит чего-либо неясного или противоречивого. Это различие между сдвинувшейся или не резко сфокусированной фотографией и снимком облаков или дымовых туманов».

Имеется также мистик (Бор), который вообще запрещает, как не научный, вопрос о чем-то существующем независимо от наблюдения, т. е. вопрос о том, жива или нет кошка в данный момент, до наблюдения. При этом обе точки зрения сливаются в мягком тумане, в котором я чувствую себя не лучше, чем при одной из указанных трактовок, занимающих определенную позицию по отношению к понятию реальности. Как и прежде, я убежден, что эта диковинная ситуация возникает от того, что мы еще не достигли полного описания положения вещей.

Я допускаю, конечно, что такое полное описание не могло бы наблюдаться в полном объеме в каждом отдельном случае, но этого и нельзя разумно требовать.

Пишу тебе это, не питая иллюзию убедить тебя, а с единственной целью разъяснить тебе мою точку зрения, приведшую меня к глубокому одиночеству. Я довел эту точку зрения до степени действительной математической теории, проверка которой, естественно, очень затруднительна.

С сердечным приветом

твой А. Эйнштейн

9. ШРЕДИНГЕР — ЭЙНШТЕЙНУ

Инсбрук, Инрайн, 15, 18 ноября 1950 г.

Дорогой Эйнштейн!

Мне кажется, что часто пользуются термином «вероятность» издевательски. Вероятность — это высказывание о том, существует или не существует что-то, следовательно, это высказывание о сомнении. Оно имеет смысл лишь тогда, когда имеется уверенность, что соответствующее что-то либо да существует, либо нет. Высказывание о вероятности предполагает полную реальность объекта. Ни один разумный человек не станет высказывать предположение о том, выпала ли игральная кость Цезаря у Рубикона пятеркой вверх. Приверженцы квантовой механики часто ведут себя так, как будто высказывания о вероятности должны применяться как раз к событиям, реальность которых неясна.

Представление о действительном существовании мира основывается на далеко идущей общности опыта многих индивидуумов, пожалуй, даже всех индивидуумов, находящихся в одинаковой или схожей ситуации по отношению к соответствующему объекту. Может быть, вместо «общности» нужно сказать «простейшим образом преобразуемой». Этот подлинный фундамент действительности игнорируется позитивистами как тривиальный. Они хотят говорить лишь о том, что «я» «найду» то или другое, когда «я» произведет измерение (и это якобы единственная реальность).

Мне кажется, что то, что я называю построением действительно существующего внешнего мира, почти совпадает с тем, что ты называешь возможностью описания (Beschreibbarkeit) неповторимо индивидуального положения вещей — как бы по-разному ни звучали эти слова. Только потому, что они запрещают нам ставить вопрос о том, что «существует», т. е. каково реальное положение



Э. ШРЕДИНГЕР

1945 г.

вещей в единичном случае, позитивистам удастся обойтись некоторым ро-
дом коллективного описания.

Они обвиняют нас в метафизической ереси за то, что мы держимся э-
той «реальности». На это можно возразить, что метафизическое значение э-
той действительности нам совершенно ясно. Она получается, так сказать, в
пересечении констатаций многих, даже всех мыслимых, отдельных набл-
дателей. Это экономичный метод обобщения их открытий, которые бессвяз-
но распадались бы, если бы мы отказались от этого образа мысли до того, как
найдем ему замену, по крайней мере, столь же полезную. Нынешняя кванто-
вая механика не дает замены. Она вовсе не знает этой проблемы. Она про-
ходит мимо нее с резвой наивностью.

Пожалуй, она справедливо требует преобразования картины действитель-
ного мира, так как она создалась за последние 300 лет со времени возрожде-
ния физики на основополагающем открытии Галилея и Ньютона, что тела
ускоряют друг друга. Этому требованию удовлетворяли тем, что наравне
с местом всему существующему приписывали также скорость в качестве мгно-
венного свойства. Некоторое время — это проходило. Но теперь, кажется

это уже не проходит. Итак, нужно вернуться на 300 лет назад и поразмыслить, как можно было тогда поступить иначе и как это изменяет все последующее развитие. Неудивительно, что это вызывает у нас безграничное замешательство.

С сердечным приветом

твой Э. Шредингер

10. ЭЙНШТЕЙН — ШРЕДИНГЕРУ

22.XII 1950 г.

Дорогой Шредингер!

Ты единственный (рядом с Лауэ) из современных физиков, кто понимает, что нельзя обходить вопрос о реальности, оставаясь честным. Большинство не дают себе отчета, какую рискованную игру они ведут с реальностью — реальность как нечто независимое от констатации. Они как-то думают, что квантовая теория дает описание действительности, притом полное описание. Это представление, однако, красивейшим образом опровергается твоей радиоактивной системой: атом+счетчик Гейгера, усилитель+взрывчатка+кошка — в одном ящике, причем ψ -функция системы содержит кошку как в живом виде, так и в распавшемся на составные части. Создается ли состояние кошки физиком, который в определенное время исследует вопрос? На самом деле никто не сомневается, что наличие или отсутствие кошки — нечто независимое от акта наблюдения. Но тогда описание с помощью ψ -функции неполное, и должно существовать более полное описание. Кто хочет рассматривать квантовую теорию (в принципе) как окончательную, тот должен полагать, что более полное описание беспредельно, потому что для него невозможно установить законов. Если бы это было так, то физика представляла бы интерес лишь для лавочников и инженеров. Все это было бы очень печально.

Ты совершенно правильно подчеркиваешь, что полное описание не может быть построено на понятии ускорения и, мне кажется, также мало на понятии частиц. Итак, из нашего набора ремесленных инструментов осталось лишь понятие поля. Но, черт знает, выдержит ли оно. Я думаю, стоит держаться его, т. е. понятия непрерывности, пока не будут действительно обоснованные причины против.

Мне кажется верным, что в принципе статистический характер теории — простое следствие неполноты описания. При этом ничего не говорится о детерминистском характере теории. Именно это понятие совершенно туманно до тех пор, пока неизвестно, сколь много нужно данных, чтобы определить «начальное состояние» («сечение»).

До некоторой степени тяжело видеть, что мы все еще находимся в положении младенцев, и неудивительно, что наши парни противятся тому, чтобы продлить это положение.

С наилучшим приветом

твой А. Эйнштейн

ВСТУПИТЕЛЬНАЯ РЕЧЬ Э. ШРЕДИНГЕРА В ПРУССКОЙ АКАДЕМИИ НАУК¹

(4 июля 1929 г.)

Сегодня, когда я приношу свою искреннюю благодарность за ту честь, которая мне оказана избранием меня в Академию наук, мне доставляет особую радость видеть во главе нас бодрым и деятельным всеми признанного мэтра, быть преемником которого в педагогической деятельности для меня большая честь и мнение которого оказало решающее влияние при вашем выборе.

Позвольте мне по возможности кратко выполнить ту неприятную обязанность, которую налагает академическая вступительная речь, — говорить о самом себе.

Старый венский институт Людвиг Больцмана, незадолго до моего появления так трагически ушедшего из жизни, где трудились Фриц Хазенбёрль и Франц Экснер и через который прошли многие другие ученики Больцмана, дал мне возможность проникнуться идеями этого могучего ума. Круг этих идей стал для меня как бы первой любовью в науке, ничто другое меня так не захватывало и, пожалуй, никогда уже не захватит. К современной теории атома я приближался очень медленно. Ее внутренние противоречия звучат как пронзительные диссонансы по сравнению с чистой, неумолимо ясной последовательностью мысли Больцмана. Было время, когда я прямо-таки готов был обратиться в бегство, однако, побуждаемый Экснером и Кольраушем, нашел спасение в учении о цвете. Чтобы путем радикальной перестройки вернуться хотя бы к прежней ясности в теории атома, мной были проверены и отброшены многие свои и чужие исследования. Известное облегчение впервые доставила мне идея де Бройля об электронных волнах, которые я использовал для построения волновой механики. Однако мы еще довольно далеки от действительного постижения того понимания природы, которое подготовлено, с одной стороны, волновой механикой, а с другой — квантовой механикой Гейзенберга.

Теоретическая физика ставит себе цель извлечь из эмпирического многообразия явлений общие черты или закономерности с тем, чтобы в пестром изобилии действительно воспринимаемого каждое событие вытекало бы из этих немногих простых закономерностей с помощью сведения первоначально необозримого многообразия событий к полностью обозримому многообразию условий опыта. Типичным для формирования науки и образцовым примером

¹ *E. Schrödinger*. In: Max Planck in seinen Akademie-Ansprachen. Berlin, 1948, S. 117. Antrittsrede in der Preus. Akad. Wiss., 1929, 4, VII. См. также: *М. Планк*. Единство физической картины мира. М., «Наука», 1966, с. 225—227; *М. Планк*. Избранные труды. М., «Наука», 1975, с. 678—679. Перевод Н. В. Яшковой.

такого охвата явлений законами может служить классическая механика: она сводит к немногим основным уравнениям поведение некоторой структуры во всех возможных обстоятельствах, а отдельные случаи при частных условиях она сводит к частным начальным условиям, математически выражаясь — к частным числовым значениям постоянных интегрирования.

В течение долгого времени пытались распространить на всю физику не только методы классической механики, но и ее самое по причине ее простоты и математической прозрачности. Пытались постичь все явления на основе механической модели. От этого давно отошли и тем более отошли сегодня, когда новейшая фаза квантовой теории низвела классическую механику до ранга науки первого приближения. Животрепещущий вопрос, который сегодня занимает нас в этой связи, — должны ли мы, отказываясь от классической механики, отказаться и от ее метода, от ее основного положения о том, что неизменные законы в сочетании со случайными начальными условиями в каждом отдельном случае однозначно определяют ход явления. Это вопрос о целесообразности нерушимого постулата причинности.

От причинности практически пришлось отказаться уже в рамках классически-механического толкования природы. У меня лично этот факт связан с глубоким юношеским впечатлением от вступительной лекции Фрица Хазенёрля, преждевременно погибшего на войне, которому я обязан основами моей научной индивидуальности. Не будет нарушением законов природы, объяснял нам Хазенёрль, если вдруг вот это полено без видимой причины поднимется в воздух. Согласно механическому пониманию природы такое чудо, как обратный процесс, не невозможно, а лишь чрезвычайно неправдоподобно.

Но вероятностное понимание законов природы, которое Хазенёрль имел в виду в этом примере, в действительности еще не грешит против постулата причинности. Неопределенность возникает при этом лишь из практической невозможности точно установить исходное состояние тела, состоящего из миллиардов атомов. Сегодня, напротив, сомнения в совершенно другом смысле: трудность установления начального состояния рассматривается не как практическая, а как принципиальная, она существует не только для сложной системы, но уже и для отдельного атома или молекулы. Суть таких взглядов в том, что для исследователя природы как такового не существует того, что принципиально ненаблюдаемо: уже состояние элементарной структуры не определяется настолько жестко, чтобы вполне определенное воздействие влекло за собой вполне определенное поведение структуры.

Франц Экснер, которому я благодарен за чрезвычайно большое содействие, был первым, кто обсуждал возможность и преимущества акаузального понимания природы в лекциях, опубликованных в 1919 г. В 1926 г. этот вопрос был по-новому поставлен в теории квантов. Он представляется вопросом фундаментального значения. Но я не верю, что в такой форме на него можно будет когда-либо ответить. По моему мнению, тут дело не о суждении относительно действительного свойства природы, как она выступает перед нами, а о целесообразности и удобстве того или иного образа нашего мышления, с которым мы подходим к явлениям природы. Анри Пуанкаре говорит, что



Erwin Schrödinger

мы можем применять к реальному пространству как евклидову геометрию, так и любую неевклидову, не опасаясь вступить в противоречие с фактами. Но физические законы, которые мы открываем, функционально зависят от применяемой нами геометрии, и может статься, что одна геометрия приводит к запутанным, а другая к гораздо более простым законам. Поэтому одна геометрия удобна, другая — неудобна, тогда как такие слова, как «правильна» и «неправильна» неуместны. Подобным образом можно было бы поступать с постулатом нерушимой причинности. Едва ли мыслимы факты опыта, которые позволят окончательно судить о том, абсолютно ли детерминировано явление природы в действительности или частично неопределенно, — они позволяют судить лишь о том, какое толкование приводит к более простой картине наблюдаемого. Однако даже до таких выводов еще далеко. Ведь мы и по отношению к геометрии Вселенной находимся лишь в более неуверенном положении после того, как благодаря Пуанкаре осознали нашу свободу выбора.

АВТОБИОГРАФИЯ Э. ШРЕДИНГЕРА¹

Я родился в 1887 г. в Вене — очень веселом и жизнерадостном городе, который в то время был столицей древней дунайской монархии. Мой отец Рудольф принадлежал к семье, по мужской линии происходившей из Верхнего Пфальца (Бавария), но уже в течение трех или четырех поколений проживавшей в Вене. За год до моего рождения отец женился на средней из трех дочерей его учителя, химика Александра Бауэра, причем я так и остался единственным ребенком моих родителей. Бауэр, профессор Венского высшего технического училища, был родом из Дейчальтенбурга; женат он был на англичанке. Моему отцу я обязан далеко не только тем, что он обеспечил семье безбедную жизнь, а мне дал прекрасное воспитание и возможность учиться, не зная забот, в то время как он сам, почти до конца своей жизни, без особого энтузиазма и таланта продолжал вести полученное им по наследству доходное предприятие по производству клеенки. Он был человеком необычайно широкого кругозора: вслед за изучением химии он в течение ряда лет усиленно занимался итальянской живописью, сопровождая эти занятия собственным творчеством в области пейзажа и графики. Это увлечение было вытеснено, в конце концов, коробкой для собирания гербария и микроскопом, в результате чего появилась целая серия статей по филогенетике растений. Подроставшему сыну он был другом, учителем, неустанным собеседником и высшей апелляционной инстанцией по всем вопросам, которые только могли интересовать сына. Моя мать была женщиной очень доброй, веселой от природы, хотя и болезненной, в вопросах практической жизни беспомощной и в то же время совершенно непритязательной. Помимо благодарности за беспредельную заботу обо мне, я благодарен ей за то чувство уважения к женщине, которое, как мне кажется, она мне внушила.

До одиннадцати лет я обучался дома под руководством учителя народной школы. Затем последовала хорошая публичная гимназия, с греческим и латинским языками, в которой точным наукам отводилось меньшее количество часов, хотя качество преподавания было превосходным. Я был хорошим учеником и одинаково относился ко всем предметам: любил математику и физику, но также строгую логику старых грамматик; я только ненавидел зубрежку «случайных» исторических и биографических дат и событий. Я любил немецких поэтов, особенно драматургов, но испытывал чувство отвращения к школьным разборам их произведений.

В течение четырех лет пребывания в Венском университете (1906—1910) я находился под сильнейшим влиянием молодого Фрица Хазенёря, как раз в то время занявшего кафедру несчастного Больцмана. В цикле лекций,

¹ В кн.: Les prix Nobel in 1933. Stockholm, 1935, с. 86—88. Перевод И. Д. Рожанского.



Дублинский коллоквиум по теоретической физике (1945 г.). Сидят (слева направо): Л. Яноши, М. Борн, П. де Брун, П. А. М. Дирак, И. де Валера, А. В. Конвей, Э. Шредингер, А. Д. Мак-Коннел, В. Гайтлер

которые читались на протяжении восьми семестров по пять часов в неделю, с величайшей обстоятельностью излагались как современные концепции теоретической механики, так и задачи на собственные значения физики непрерывных сред, которые впоследствии очень мнегодились, так как изучение по одним лишь книгам мне всегда давалось с трудом. В последующие годы, будучи ассистентом Франца Экснера и в тесном сотрудничестве с моим другом К. В. Ф. Кольраушем, я понял, что такое экспериментальная работа, хотя сам я так никогда и не овладел ею.

Затем наступила война, в которой я принял участие в качестве артиллерийского офицера на Юго-Западном фронте; я закончил ее без ранений или болезней. Но Фриц Хазенёрль погиб, и внутреннее чувство говорит мне, что если бы этого не случилось, его имя звучало бы сегодня вместо моего.

В 1920 г., вскоре после смерти моего отца, я, вместе с молодой женой из Зальцбурга, переехал в Йену, где Макс Борну нужен был ассистент, который достаточно хорошо разбирался бы в современной теории, чтобы ее преподавать: После одного семестра в Йене последовал Штутгарт (экстраорди-

нарный профессор), затем университет в Бреслау (ординарный профессор) и, наконец, я осел на целых шесть лет в Цюрихском университете. Здесь я наслаждался дружеским общением и помощью Германа Вейля, Петера Дебая и других; кроме того, этот небольшой городок, будучи излюбленной остановкой для всех, едущих в Швейцарию и дальше на юг, служил своего рода перевалочным пунктом, где можно познакомиться и обменяться мнениями с коллегами из самых разных стран.

В 1927 г. я был приглашен на кафедру Планка в Берлин. Два больших высших учебных заведения, Имперский институт, Институт кайзера Вильгельма, астрофизическая обсерватория и целый ряд промышленных научно-исследовательских центров создавали тогда в Берлине беспрецедентную плотность населения физиков первого ранга. Глубокое впечатление производил уже самый вид еженедельных коллоквиумов, где физики собирались все вместе, каждый раз образуя как бы маленький конгресс, а обсуждение всех жгучих вопросов современной науки на этих собраниях доставляло величайшее наслаждение. При этом чувствовалось, что на тебе лежит лишь малая доля ответственности, так как всегда можно было скрыться в числе тех, кто превосходил тебя по возрасту и авторитету. Для науки это были очень хорошие и очень свободные годы. Сейчас я не могу сказать, навсегда ли ушли они в прошлое.

В моих научных работах, как и вообще в жизни, я никогда не придерживался какой-либо генеральной линии, не следовал руководящей программе, рассчитанной на длительные сроки. Хотя я очень плохо умею работать в коллективе, в том числе, к сожалению, и с учениками, тем не менее моя работа никогда не была совершенно самостоятельной, поскольку мой интерес к какому-либо вопросу всегда зависит от интереса, проявляемого к этому же вопросу другими. Я редко говорю первое слово, но часто второе, так как побудительным фактором для него обычно оказывается желание возразить или исправить, — неважно, что дальнейший ход обсуждения оказывается подчас гораздо более существенным, чем мое возражение, которое послужило лишь исходным толчком.

Самой интересной областью физики мне всегда казалась вероятностная трактовка термодинамики, развитая Больцманом; с ней связаны мои многие прежние работы, опубликованные в «Wiener Berichte», и более новые, появлявшиеся в «Berliner Berichte». Вторую группу образуют работы, относящиеся к учению о цвете и возникшие в результате общения с Кольраушем и Экснером, а также лекций Гельмгольца. Ценным в них мне представляется лишь достигнутое в конце концов понимание подлинного значения трех- и четырехцветного восприятия и его взаимосвязи с филогенией цветного зрения («Wiener Berichte», 1925). В квантовой теории открытие «проникающих орбит» («Zeitschrift für Physik», 1920) представляло собой небольшой, но положительный частный успех. Установление того (там же, 1922), что масштабный множитель Вейля для замкнутых квантованных орбит является целочисленной степенью некоторой универсальной постоянной, которая, возможно, равна единице, представляется важным как предвосхищение, разумеется бессознательное, не только теории Л. де Бройля, но даже внутрен-

ней связи между теорией электрона Дирака и геометрической теорией электромагнитного поля Вейля («*Berliner Berichte*», 1932, S. 105). Удостоенные в настоящее время премии работы по квантовой теории были написаны одна за другой в первой половине 1926 г. в Цюрихе, опубликованы в «*Annalen der Physik*» и вскоре после этого выпущены отдельной книгой издательством Й. А. Барта в Лейпциге. Они тесно примыкают к работам Л. де Бройля; их основная мысль изложена в моей Нобелевской лекции.

Вот краткое изложение внешних событий жизни Э. Шредингера после 1933 г.¹ Уже весной 1933 г. Ф. А. Линдеман (позже лорд Черуэлл) при одном из посещений Берлина, когда Шредингер выразил ему свое отрицательное отношение к тогдашнему режиму, предложил ему «убежище» в Оксфорде. Осенью 1933 г. Шредингер приехал в Оксфорд, где он стал Fellow of Magdalen College и получил содержание от Imperial Chemical Industry. В 1936 г. Шредингер получил приглашение в Эдинбург и Грац. Находясь в совершенном неведении политической ситуации, он вернулся на родину, откуда вынужден был уже в сентябре 1938 г. бежать. Он обязан выдающемуся государственному деятелю Ирландии И. де Валера, основавшему в Дублине исследовательский институт, тем, что провел в этом Institute for Advanced Studies семнадцать чудесных лет.

В 1956 г. Шредингер покинул прекрасный зеленый остров и опять последовал призыву родины, которая делала все, чтобы вернуть его в Вену. Правительству Австрии он был благодарен до своей кончины за то, что он, уже 69-летний, смог вернуться на место своей первой научной деятельности — физический факультет Венского университета.

4 января 1961 г. Э. Шредингер умер в Вене и был похоронен в Альпвахе, маленькой тихой деревушке, среди любимых им Тирольских гор.

Анна Мария Шредингер,
май 1961 г.

¹ Приложение к кн.: *E. Schrodinger. Was ist ein Naturgesetz?* München—Wien, 1962, S. 145—146. — *Прим. ред.*

ЭРВИН ШРЕДИНГЕР И ВОЗНИКНОВЕНИЕ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Л. С. Полак

ВВЕДЕНИЕ

1924—1927 гг. — годы рождения квантовой механики — изменили не только наши знания о микрокосмосе, не только обогатили теоретическую физику, но и внесли принципиально новые основополагающие компоненты в наше миропонимание. У науки также бывают «звездные часы человечества» (Стефан Цвейг).

30 апреля 1897 г. Дж. Дж. Томсон сообщил на заседании Royal Institution of Great Britain об открытии электрона, за исследование корпускулярных свойств которого (в том числе e/m) ему была присуждена Нобелевская премия в 1906 г. Сорок лет спустя после этого открытия в 1937 г. К. Девиссон и Г. П. Томсон получили Нобелевскую премию за «экспериментальное открытие интерференционных явлений» в кристаллах, облученных электронами. Таким образом, Томсон-отец получил Нобелевскую премию за то, что он показал, что электрон есть частица, а Томсон-сын — за то, что он показал, что электрон — волна.

Квантовая механика¹ возникла из двух слившихся в дальнейшем потоков: матричной механики и волновой механики. Здесь нами рассмотрена только вторая, с акцентом, безусловно заслуженным, на работы Э. Шредингера. Читатель-физик знает уравнение Шредингера (и, зачастую, не очень хорошо знает о самом Шредингере), знает (по крайней мере, основы) квантовую механику, синтезировавшую матричную и волновую механику и статистическую интерпретацию основной функции Шредингера — функции ψ . Поэтому некоторая односторонность нашего изложения, связанная с самим характером настоящего издания избранных работ Шредингера, не приведет к искажению исторической ретроспективы².

К концу первой четверти XX в. внутренние противоречия теории Бора и расхождения ее с экспериментальными данными, с одной стороны, и широкий круг явлений корпускулярно-волнового дуализма — с другой действительно требовали новых научных подходов, нового глубокого синтеза.

¹ Термин «квантовая механика» был впервые применен в литературе по теоретической физике М. Борном в 1924 г. (*M. Born. Z. Phys.*, 1924, 26, 279).

² Для ознакомления с историей возникновения квантовой механики мы отсылаем к книгам, статьям и воспоминаниям различных ученых, например, указанным в примечании на с. 393). Глубокое изложение квантовой механики (и основных из ее поистине бесчисленных приложений) см., например, в курсе теоретической физики Л. Ландау и Е. Лившица.

ОПТИКО-МЕХАНИЧЕСКАЯ АНАЛОГИЯ ГАМИЛЬТОНА

Первая треть XIX в.

Вновь возрожденная трудами Юнга ³, Френеля ⁴ и ряда других ученых ⁵ волновая теория света одерживала одну победу за другой, постепенно расширяя круг объясняемых ею явлений. Однако и корпускулярная теория еще не уступила ей места и объясняла новые экспериментальные факты, хотя и с помощью введения усложняющих и довольно произвольных гипотез. Решающий эксперимент, который позволил бы окончательно решить вопрос в пользу той или другой теории, еще не был выполнен. Поэтому создавалось представление, что обе теории, описывающие совокупность оптических явлений, не затрагивают их сущности, что можно применять ту или иную из них в каждом конкретном случае в зависимости от характера рассматриваемой задачи или просто считать, что вопрос об истинности этих двух теорий остается до поры до времени открытым. Можно было говорить о существовании дуализма — волнового и корпускулярного — в физическом представлении как о природе света, так и о наблюдаемых экспериментально физических явлениях.

То, что для Гюйгенса и Юнга являлось проблемой, для Уильяма Роуэна Гамильтона — исходный пункт. Они ставили себе задачу объяснить опытный факт прямолинейного распространения света, выведя его из каких-то причин, скрытых во внутренней природе световых явлений. Гамильтон видит свою задачу не в объяснении этого факта, а в такой его формулировке, которая максимально удовлетворяла бы стремлению к единству и стройности математической схемы.

Занятия Гамильтона общей теорией оптических систем связаны с проблемами изучения оптических свойств оптических инструментов. Это видно из простого перечисления названий некоторых его работ ⁶. Клейн говорит по этому поводу: «При своих исследованиях систем лучей Гамильтон имел в виду прежде всего практические запросы инструментальной науки. Поэтому он оперировал исключительно с такими световыми волнами, которые исходят из отдельных точек» ⁷.

В основу своего исследования Гамильтон положил принцип Ферма.

В начальной стадии своих исследований Гамильтон исходил из теоремы Малюса, которую он, очевидно, знал только в том частном виде, который ей

³ Л. С. Полак. Из истории развития волновой теории света. — Вопросы истории естествознания и техники, 1956, вып. 2, 76—91.

⁴ О. Френель. Избранные труды по оптике. М., ГТТИ, 1955.

⁵ Я. Г. Дорфман. Всемирная история физики. Т. 1. М., «Наука», 1975.

⁶ «On the Effect of Aberration in Prismatic Interference»; «The Auxiliary Function for Two Thin Lenses Close together in Vacuo and for a Single Thin Lens in Vacuo»; «The Aberration of an Optical Instrument of Revolution»; «Two letters to Professor Phillips on the Construction of Object Glasses»; «On the Improvement of the Double Achromatic Object Glass» и т. д. In: W. R. Hamilton. Math. Papers, v. 1. Geometr. Optics. Cambridge, Univ. Press, 1931.

⁷ F. Klein. Über neuere englische Arbeiten zur Mechanik. In: Ges. Math. Abh. Bd. 2. Springer, 1922, S. 601—602. Рус. пер. в сб.: Вариационные принципы механики. Ред. Л. С. Полак. М., Физматгиз, 1959, с. 513—514.

придал сам Малюс. В 1808 г. Малюс установил теорему, которая играет основную роль в геометрической оптике. Важнейшая задача геометрической оптики состоит в исследовании световых лучей, вышедших из общей точки и претерпевших многократное отражение или преломление. В теории оптических лучей большую роль играют понятия теории поверхностей⁸. В век Лагранжа, Лапласа, Монжа совершенно закономерно аналитическое исследование геометрических свойств световых лучей. Малюс так и говорит, что «лучи, выходящие из светящейся точки в среду однородной плотности, могут быть рассматриваемы как система прямых линий, проходящих через эту точку. Когда эти лучи встречаются поверхность некоторого тела, которое их отражает или преломляет, их взаимное расположение испытывает различные изменения, откуда возникают все явления оптики. Прежде чем перейти к анализу этих явлений, мы изложим некоторые свойства, общие всем пучкам лучей, отраженных или преломленных (не параллельных).

Пусть

$$m(z - z') = o_2^2(x - x'), \quad n(z - z') = o(y - y') \quad (1)$$

— уравнения прямой линии, принадлежащей к системе лучей, расположенных в пространстве согласно некоторому аналитическому закону, а m , n , o — произвольные функции от x' , y' , z' . Каждой точке пространства, т.е. каждому частному значению x , y , z соответствуют новые линии, принадлежащие к той же системе»⁹.

Этим методом, аналогичным методу аналитической геометрии, Малюс рассматривает проблемы геометрической оптики. Установленная им теорема формулируется в этой работе дважды: один раз для случая отражения, а другой — для случая преломления света. В первом случае формулировка гласит: «Система отраженных лучей может быть рассматриваема как место пересечения двух систем поверхностей разверток, которые пересекают поверхность (F) зеркала по двум рядам кривых (SS) и $(S'S')$, а точки встречи этих лучей находятся на двух кривых поверхностях (Σ) , (Σ') , которые мы называем каустическими поверхностями»¹⁰.

Малюс установил эту теорему для случая однократного отражения или преломления лучей, вышедших из некоторой точки. Он считал, что применимость теоремы ограничена только случаем единичного преломления и отражения и что она неприменима уже в случае вторичного¹¹. В 1816 г. Дюпен дал очень простое доказательство теоремы для случая отражения в самом общем виде¹². Французская академия наук создала специальную комиссию

⁸ Геометрия систем лучей впоследствии была подробно и в очень общем виде разработана Куммером в работе: *Allgemeine Theorie der geradlinigen Strahlungssysteme*. — *Crelle J.*, 1860, 57, 189—230.

⁹ *E. Malus. Optique*. — *J. École Polytechn.*, 1808, 7, 1—44, 84—129.

¹⁰ *E. Malus. Ibid.*, p. 13. Вторая формулировка (для случая преломления) находится на с. 84 этой работы.

¹¹ *E. Malus. Traité d'Optique, Mémoires présentés à l'Institut par divers savants*. Paris, 1811, p. 214—302.

¹² *F. Dupin. Applications de Géometrie*. Paris, 1822, p. 195—197.

в составе Араго, Ампера и Коши для рассмотрения работы Дюпена. Доказательство, данное Дюпеном, основывалось на том, что все отраженные лучи нормальны к огибающим сферам, имеющим центры на зеркале, и касаются одной из поверхностей, к которым нормальны падающие лучи. Однако общего доказательства теоремы Малюса еще не было. Полное доказательство теоремы искал Дюпен, но ему удалось дать строгое обоснование только для случая отражения. В 1825 г. Кэтле и одновременно с ним Жергон¹³, продолжая работу Дюпена, дали полное доказательство теоремы. Таким образом, теорема Малюса была доказана в общем виде.

В 1824 г. 19-летний Гамильтон написал оставшуюся неопубликованной работу «On Caustics» («О каустиках»). С того момента, когда он в 1827 г. стал во главе Дублинской обсерватории, его интерес к оптике нашел и более непосредственное практическое основание.

Начиная с 1827 г. Гамильтон публикует ряд работ по «теории систем лучей»¹⁴. По поводу формы этих работ Клейн делает очень меткое замечание. Он говорит, что «эти статьи по их форме суть все, что угодно, только не безупречные; в необозримом, неуклюжем порядке, полные невыведенных намеков и повторений, они все-таки представляют собой большое богатство мыслей»¹⁵. Первые работы Гамильтона были «по форме весьма растрепанными»¹⁶, замечает Лармор.

Эти работы, завершившиеся блестящим предсказанием существования конической рефракции¹⁷, представляют основное из того, что сделано Гамильтоном в оптике. Он подошел к проблемам геометрической оптики с общей точки зрения, стремясь найти такое математическое соотношение, к которому сводились бы все проблемы этой науки. Он исходил при этом из мысли, что этап индукции, который он считал в развитии всякой науки предшествующим этапу дедукции, для геометрической оптики уже завершен.

Поэтому метод Гамильтона «...основывается на моем общем взгляде на оптику или скорее на еще более общей идее, примеры которой я дал

¹³ L. Quetelet. Correspondance mathématique et physique, 1825, 1, p.147—149. J. Gergonne. Ann. Math., 1826, 16, 307.

¹⁴ W. R. Hamilton. Theory of Systems of Rays. — In: Math. Pap., v. 1; Geometrical Optics. Cambridge. Univ. Press., 1931.

¹⁵ Ф. Клейн. Лекции о развитии математики в XIX столетии. Ч. 1. М.—Л., 1937, с. 239.

¹⁶ J. Larmor. Mathematical and Physical Papers, v. 1 (Appendix). London, 1927, p. 640.

¹⁷ Обобщая принцип Ферма, Гамильтон рассматривал v не только как функцию координат точки x , и y , но и как функцию направляющих косинусов α , луча по отношению к некоторой особой системе осей кристалла. Это дало ему возможность подойти к задаче распространения света в двусосных кристаллах. Исследуя волновую поверхность в двусосных кристаллах, Гамильтон дал ясную картину ее геометрической формы и открыл существование четырех плоскостей, касающихся ее вдоль конических сечений, обобщив принцип Ферма на анизотропные среды.

Третье добавление к «Теории систем лучей» было представлено Гамильтоном Ирландской академии 22 октября 1832 г. В нем было теоретически предсказано существование внешней и внутренней конической рефракции. Гамильтон немедленно по получении этого результата написал своему другу Г. Ллойд, прося его осуществить соответствующие опыты. После больших затруднений и неудач Ллойд удалось обнаружить предсказанные Гамильтоном явления. 14 декабря 1832 года Ллойд сообщил Гамильтону запиской, что он, наконец, нашел коническую рефракцию на кристаллах арагонита.

в динамике»¹⁸. А поскольку Гамильтон рассматривает геометрическую оптику, постольку он прав, когда говорит: «... Для образования моего общего метода не является даже необходимым принимать какое-либо частное мнение о природе света...»¹⁹.

Основные выражения, найденные Гамильтоном, связывают x_{0i} , x_i — координаты точек системы, α_{0i} , α_i — косинусы углов наклона луча или элемента траектории к осям координат, v — величину, которая по корпускулярной гипотезе представляет скорость этого элемента, χ — «цвет» (частоту) света.

Введем

$$V = \int v ds, \quad (2)$$

где ds — элемент траектории, V — характеристическая функция Гамильтона.

Тогда

$$\alpha_i = \frac{1}{v} \frac{\partial V}{\partial x_i}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (3)$$

и, следовательно,

$$v^2 = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial V}{\partial x_i} \right)^2. \quad (4)$$

Интегрируя (2) по частям и варьируя, найдем

$$\delta \int v ds = \sum_i \left(\frac{\partial v}{\partial \alpha_i} \delta x_i - \frac{\partial v_0}{\partial x_{0i}} \delta_0 x_{0i} \right) + \int \sum_i \delta x_i \left(\frac{\partial v}{\partial x_i} ds - d \frac{\partial v}{\partial x_i} \right), \quad (5)$$

причем согласно принципу наименьшего действия (принципу Ферма — для Гамильтона они совпадают) должно быть

$$\frac{\partial v}{\partial x_i} ds = d \frac{\partial v}{\partial x_i}. \quad (6)$$

Отметим сразу следующее. Во-первых, два уравнения (6), очевидно, определяют третье. Во-вторых, эти уравнения непосредственно связаны с уравнениями динамики в форме Лагранжа. В самом деле, обозначив $\alpha_i = \frac{dx_i}{ds} = x'_i$, найдем,

$$\frac{d}{ds} \frac{\partial v}{\partial x'_i} - \frac{\partial v}{\partial x_i} = 0, \quad (7)$$

где $v = v(x_i, x'_i)$.

¹⁸ У. Р. Гамильтон. Письмо к Aubrey de Vere. 9.V 1834. Цит. по: Graves. Life of Sir Hamilton W. R. Dublin, 1869, p. 49.

¹⁹ У. Р. Гамильтон. Письмо к Кольриджу. 3.X 1832. Цит. по: Graves, p. 46.

Это уравнение имеет ту же форму, что и известные уравнения динамики Лагранжа второго рода²⁰, которые являются необходимым условием для существования экстремума интеграла принципа Гамильтона—Остроградского.

Таким образом, уже здесь отчетливо видна связь развиваемой Гамильтоном математической теории систем лучей с механикой.

В третьем добавлении к «Теории систем лучей» v есть функция вида $v=v(x_i, x_{0i}, \chi)$ и

$$\delta V = \delta \int v ds = \sum_i \left(\frac{\partial v}{\partial \alpha_i} \delta x_i - \frac{\partial v_0}{\partial \alpha_{0i}} \delta x_{0i} \right), \quad (8)$$

причем δV стационарно при распространении света. Это уравнение распадается, как это очевидно, на шесть уравнений, которые дают решение фундаментальной задачи математической оптики: определение зависимости α_i, α_{0i} от x_i, x_{0i}, χ . Форма функций v и v_0 (т. е. оптические свойства конечной и начальной сред) может быть выведена из характеристической функции V .

Гамильтон показывает, что если V есть однородная функция α_i , а для V имеем два уравнения в частных производных

$$\begin{aligned} \Omega \left(\frac{\partial V}{\partial x_i}, x_i, \chi \right) &= 0, \\ \Omega' \left(\frac{\partial V}{\partial x_{0i}}, x_{0i}, \chi \right) &= 0, \end{aligned} \quad (9)$$

то, обозначив $\frac{\partial V}{\partial x_i} = \sigma_i$ и $-\frac{\partial V}{\partial x_{0i}} = \sigma_{0i}$, получим

$$\Omega(\sigma_i, x_i, \chi) = 0, \quad \Omega'(\sigma'_{0i}, x'_{0i}, \chi) = 0 \quad (10)$$

и

$$\frac{\alpha_i}{v} = \frac{\partial \Omega}{\partial \sigma_i}, \quad \frac{\alpha_{0i}}{v_0} = \frac{\partial \Omega}{\partial \sigma_{0i}}, \quad (11)$$

откуда после простых преобразований найдем

$$\frac{dx_i}{dV} = \frac{\partial \Omega}{\partial \sigma_i}, \quad \frac{d\sigma_{0i}}{dV} = -\frac{\partial \Omega}{\partial x_{0i}}. \quad (12)$$

Родство формы уравнений (12) с уравнениями динамики очевидно: V соответствует интегралу действия Эйлера—Лагранжа, уравнение (10) — уравнению живых сил, χ — некоторой функции полной энергии.

Уравнения (12) имеют форму канонических уравнений динамики и выражают непрерывное перемещение поверхности $V=\text{const}$, как касательное преобразование вдоль луча.

²⁰ Уравнения Лагранжа впервые встречаются в ранней его работе, напечатанной в «Miscellanea Taurinensia» (1760, 2), см. также: Oeuvres, t. 1, p. 411. Полученный результат, конечно, не является неожиданным по самому смыслу вариационной задачи.

Следовательно, развивая метод характеристической функции, мы вновь получили уравнения, имеющие форму уравнений динамики с той лишь разницей, что раньше были получены уравнения, имеющие форму уравнений Лагранжа, теперь же — канонические уравнения, введенные в динамику Гамильтоном.

С математической точки зрения переход от одной системы переменных $x, y, z, \alpha, \beta, \gamma$ к системе $x', y', z', \alpha', \beta', \gamma'$, или переход от одной поверхности к другой, можно рассматривать как преобразование.

Если две первоначальные поверхности касаются в какой-либо точке, то полученные из них преобразованием две поверхности также будут касаться в некоторой точке, сопоставленной первой точке. Поэтому Софус Ли и назвал это преобразование, определяемое функцией V , касательным²¹.

Проанализируем переход от корпускулярной к волновой оптике в рамках теории систем лучей Гамильтона²².

Обозначим через $V(x, y, z, x', y', z')$ — время, которое требуется для волны частоты (по терминологии Гамильтона — цвета) χ , исходящей из источника (x', y', z') , чтобы достигнуть (x, y, z) . Покажем, как должна быть определена функция V , когда ω — нормальная скорость распространения волны — дана как функция α, β, γ (направляющих косинусов нормали к фронту волны) и x, y, z .

Эту функцию $\omega(\alpha, \beta, \gamma, x, y, z, \chi)$ мы предполагаем однородной, нулевой степени относительно α, β, γ , причем $\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$.

Уравнение волны, вышедшей из x', y', z' в $t=0$, будет

$$V(x, y, z, x', y', z', \chi) = t. \quad (13)$$

Если волна проходит через $(x+\delta x, y+\delta y, z+\delta z)$ в момент времени $t+\delta t$, то

$$\sum \frac{\partial V}{\partial x} \delta x = \delta t. \quad (14)$$

Имеем

$$\sum \lambda \delta x = \omega \delta t \text{ и т. д.} \quad (15)$$

и, следовательно,

$$\frac{\partial V}{\partial x} = \frac{\lambda}{\omega}, \quad \frac{\partial V}{\partial y} = \frac{\mu}{\omega}, \quad \frac{\partial V}{\partial z} = \frac{\nu}{\omega}. \quad (16)$$

Отсюда получаем

$$\omega \left\{ \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial z} \right)^2 \right\}^{1/2} - 1 = 0. \quad (17)$$

Это уравнение может быть записано так:

$$\Omega \equiv \omega \left(\frac{\partial V}{\partial x}, \frac{\partial V}{\partial y}, \frac{\partial V}{\partial z}, x, y, z, \chi \right) \left\{ \left(\frac{\partial V}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial V}{\partial z} \right)^2 \right\}^{1/2} - 1 = 0. \quad (18)$$

²¹ S. Lie. Störungstheorie und die Berührungstransformation. — Arch. Math. naturvid., 1877, 2, S. 129—156; в сб.: Вариационные принципы механики, с. 404—424

²² См.: W. R. Hamilton. Math. Pap., v. 1, 1931, p. 497—499

Это уравнение в частных производных для V вместе с граничными условиями для $x=x'$, $y=y'$, $z=z'$ определяет V как функцию x , y , z , x' , y' , z' , χ . Обозначив

$$\sigma = \frac{\partial V}{\partial x}, \quad \tau = \frac{\partial V}{\partial y}, \quad \nu = \frac{\partial V}{\partial z}, \quad (19)$$

запишем уравнение (18) в виде

$$\Omega(\sigma, \tau, \nu, x, y, z, \chi) = 0, \quad (20)$$

$\Omega+1$ однородно и первой степени относительно σ , τ , ν .

Следовательно, так как соотношение (20) удовлетворяется тождественно для всех значений x , y , z , x' , y' , z' , χ , то:

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \sigma} \frac{\partial^2 V}{\partial x \partial x'} + \frac{\partial \Omega}{\partial \tau} \frac{\partial^2 V}{\partial y \partial x'} + \frac{\partial \Omega}{\partial \nu} \frac{\partial^2 V}{\partial z \partial x'} = 0 \quad \text{и т. д.}, \quad (21)$$

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \sigma} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial \Omega}{\partial \tau} \frac{\partial^2 V}{\partial y \partial x} + \frac{\partial \Omega}{\partial \nu} \frac{\partial^2 V}{\partial z \partial x} + \frac{\partial \Omega}{\partial x} = 0 \quad \text{и т. д.}, \quad (22)$$

$$\frac{\partial \Omega}{\partial \sigma} \frac{\partial^2 V}{\partial x \partial \chi} + \frac{\partial \Omega}{\partial \tau} \frac{\partial^2 V}{\partial y \partial \chi} + \frac{\partial \Omega}{\partial \nu} \frac{\partial^2 V}{\partial z \partial \chi} + \frac{\partial \Omega}{\partial \chi} = 0. \quad (23)$$

Из уравнения (21) получим $\frac{\partial \left(\frac{\partial V}{\partial x}, \frac{\partial V}{\partial y}, \frac{\partial V}{\partial z} \right)}{\partial (x, y, z)} = 0$, и, следовательно, существует соотношение вида

$$\Omega' = \left(-\frac{\partial V}{\partial x'}, -\frac{\partial V}{\partial y'}, -\frac{\partial V}{\partial z'}, x', y', z', \chi \right) = 0. \quad (24)$$

В волновой теории лучи могут быть лучше всего определены фазовым условием. Луч, соответствующий данному начальному волновому элементу (x', y', z')

$$p \delta x' + q \delta y' + r \delta z' = 0, \quad (25)$$

может быть определен условием, что возмущения (все некоторого определенного «цвета» χ), выходящие одновременно из всех точек (25), одновременно достигают каждой точки луча. Мы можем поэтому рассматривать (25) как элемент, все точки которого колеблются в одной фазе с частотой, соответствующей χ , и определять луч как геометрическое место точек, в которых результирующие возмущения находятся в фазе. Волновая скорость, которую мы обозначим через u , есть тогда скорость распространения определенной фазы вдоль луча. Из этого определения следует, что любая точка луча должна удовлетворять соотношению

$$\frac{\partial V}{\partial x'} \delta x' + \frac{\partial V}{\partial y'} \delta y' + \frac{\partial V}{\partial z'} \delta z' = 0 \quad (26)$$

для всех точек $\delta x'$, $\delta y'$, $\delta z'$, совместных с (25). Таким образом, в (x, y, z) луч характеризуется уравнением

$$\frac{\partial V}{\partial x} : \frac{\partial V}{\partial y} : \frac{\partial V}{\partial z} = p : q : r. \quad (27)$$

Так как согласно уравнению (25) эти величины постоянны, то для всех лучей, исходящих из x' , y' , z' , будет

$$\frac{\partial V}{\partial x'} = \text{const}, \quad \frac{\partial V}{\partial y'} = \text{const}, \quad \frac{\partial V}{\partial z'} = \text{const}. \quad (28)$$

Из уравнения $V = V(x_i, x'_i, \chi) = t$ получим

$$u(\sigma\alpha + \tau\beta + \nu\gamma) = 1 \quad (29)$$

и из (28)

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x' \partial x} \alpha + \frac{\partial^2 V}{\partial x' \partial y} \beta + \frac{\partial^2 V}{\partial x' \partial z} \gamma = 0 \quad \text{и т. д.} \quad (30)$$

Сравнивая (30) с (21), получаем соотношение

$$\alpha : \beta : \gamma = \frac{\partial \Omega}{\partial \sigma} : \frac{\partial \Omega}{\partial \tau} : \frac{\partial \Omega}{\partial \nu}, \quad (31)$$

которое дает α , β , γ как функции $x, y, z, x', y', z', \chi$. Из факта однородности $\Omega + 1$, а также из уравнений (29), (31) получим соотношения

$$\alpha u = \frac{\partial \Omega}{\partial \sigma}, \quad \beta u = \frac{\partial \Omega}{\partial \tau}, \quad \gamma u = \frac{\partial \Omega}{\partial \nu}, \quad (32)$$

которые по исключению σ/ν , τ/ν дадут u как функцию $\alpha, \beta, \gamma, x, y, z, \chi$.

Пусть $1/u$ будет однородной и первой степени относительно α, β, γ . Продифференцировав (32), исключив $\delta\sigma$, $\delta\tau$, $\delta\nu$ с помощью однородности $\Omega + 1$ и рассматривая $\delta\alpha$, $\delta\beta$, $\delta\gamma$, δx , δy , δz , $\delta\chi$ как произвольные (но учитывая, что $\alpha\delta\alpha + \beta\delta\beta + \gamma\delta\gamma = 0$), получим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{1}{u} \right) &= \sigma, & \frac{\partial}{\partial \beta} \left(\frac{1}{u} \right) &= \tau, & \frac{\partial}{\partial \gamma} \left(\frac{1}{u} \right) &= \nu; \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{u} \right) &= -\frac{1}{u} \frac{\partial \Omega}{\partial x}, & \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{u} \right) &= -\frac{1}{u} \frac{\partial \Omega}{\partial y}; \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{u} \right) &= -\frac{1}{u} \frac{\partial \Omega}{\partial z}, & \frac{\partial}{\partial \chi} \left(\frac{1}{u} \right) &= -\frac{1}{u} \frac{\partial \Omega}{\partial \chi}. \end{aligned} \quad (33)$$

Из определения функции V как волнового времени следует

$$V(x, y, z, x', y', z', \chi) = \int_{x', y', z'}^{x, y, z} \frac{ds}{u(\alpha, \beta, \gamma, x, y, z, \chi)}, \quad (34)$$

причем интеграл берется вдоль луча.

Покажем, что лучи действительно суть экстремали этого интеграла ²³. Уравнения экстремалей

$$\frac{d}{ds} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{1}{u} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{u} \right) = 0 \quad \text{и т. д.} \quad (35)$$

Для луча согласно уравнениям (33) и (22) получим

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \frac{\partial}{\partial \alpha} \left(\frac{1}{u} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{u} \right) &= \frac{d}{ds} \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{1}{u} \frac{\partial \Omega}{\partial x} = \alpha \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \beta \frac{\partial^2 V}{\partial x \partial y} + \gamma \frac{\partial^2 V}{\partial x \partial z} + \frac{1}{u} \frac{\partial \Omega}{\partial x} = \\ &= \frac{1}{u} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \sigma} \frac{\partial^2 V}{\partial x^2} + \frac{\partial \Omega}{\partial \tau} \frac{\partial^2 V}{\partial x \partial y} + \frac{\partial \Omega}{\partial \nu} \frac{\partial^2 V}{\partial x \partial z} + \frac{\partial \Omega}{\partial x} \right) = 0. \end{aligned} \quad (36)$$

Следовательно, лучи действительно являются экстремалими. Если мы определим

$$v(\alpha, \beta, \gamma, x, y, z, \chi) = \frac{1}{u(\alpha, \beta, \gamma, x, y, z, \chi)}, \quad (37)$$

тогда лучи есть экстремали $\int v ds$ и V равно $\int_{x', y', z'}^{x, y, z} v ds$, взятому вдоль некоторой экстремали.

Таким образом, применимость гамильтонова метода к волновой теории установлена, причем v интерпретируется как обратная величина волновой скорости.

Итак, Гамильтон показал, что геометрическая оптика сводится к одному и тому же аналитическому аппарату, независимо от того, пользуемся ли мы в физической оптике волновыми или корпускулярными представлениями. Луч может быть истолкован и как нормаль к некоторой волновой поверхности, и как траектория потока световых частиц. Математический формализм теории и в том, и в другом случае один и тот же.

В корпускулярной теории для скорости v имеем $v = cn$, где c — скорость света в пустоте, а n — коэффициент преломления данной среды, а в волновой теории $\omega = c/n$. Отсюда следует, что $v = c^2/\omega$ и интеграл

$$\int_0^1 v ds = \int_0^1 c^2 \frac{ds}{\omega} = \int_0^1 c^2 dt = c^2 (t_1 - t_0) \quad (38)$$

представляет (с точностью до постоянного множителя c^2) то время, которое необходимо для распространения волны от точки (x_0, y_0, z_0) до точки (x_1, y_1, z_1) по данному направлению.

²³ Интересные геометрические свойства экстремалей были отмечены в 1904 г. Каратеодори. Он показал, что экстремали можно рассматривать как кривые наискорейшего спуска. Теория, развитая Каратеодори, приводит к дифференциальным уравнениям теории Гамильтона — Якоби (C. Carathéodory. Über diskontinuierliche Lösungen in der Variationsrechnung. 1904. Диссертация.)

Дадим теперь характеристику отношения оптики Гамильтона к его динамике.

Функция V оптики соответствует интегралу действия в динамике, величины σ , τ , ν — компонентам импульса, $\Omega(\sigma, \tau, \nu, x, y, z, \chi) = 0$ — уравнению энергии, $\Omega\left(\frac{\partial V}{\partial x}, \frac{\partial V}{\partial y}, \frac{\partial V}{\partial z}, x, y, z, \chi\right) = 0$ — первому уравнению в частных производных Гамильтона в динамике, а χ в обоих случаях соответствует некоторой функции полной энергии.

Так как обобщение оптического метода на любое число измерений не вызывает затруднений, то мы рассмотрим связь оптической теории и динамики в общем случае и будем писать x^r вместо (x, y, z) , a^r вместо (α, β, γ) , σ_r вместо (σ, τ, ν) .

Пусть имеем динамическую систему с n координатами x^r , кинетической энергией

$$T = \frac{1}{2} a_{rs} \dot{x}^r \dot{x}^s \quad (39)$$

и потенциальной энергией $\varphi(x)$. Необходимо далее выбрать метрику в x -пространстве; возьмем

$$ds^2 = a_{rs} dx^r dx^s; \quad (40)$$

так как $v = \frac{ds}{dt} = \sqrt{2T}$, то

$$v = \sqrt{2(E - \varphi)}. \quad (41)$$

Траектории движения будут экстремалами $\int v ds$. Таким образом, движение механической системы полностью представлено оптикой («эмиссионной теорией») в среде n измерений, причем функция среды v дана уравнением (41), а E соответствует цветовому индексу χ . Следовательно, можно применить оптическую теорию Гамильтона для того, чтобы получить уравнение динамической системы.

Для того чтобы ввести v в метод Гамильтона, напомним $a^r = \frac{dx^r}{ds}$ (a^r — направляющие косинусы лучей). Тогда из уравнения (39) имеем

$$a_{rs} a^r a^s = 1 \quad (42)$$

и выражение (41) запишется так:

$$v = \sqrt{2(E - \varphi) a_{rs} a^r a^s}, \quad (43)$$

а так как $V = \int_{x_1}^x v ds$, то согласно методу Гамильтона

$$\sigma_r = \frac{\partial V}{\partial x^r} = \frac{\partial v}{\partial a^r} = a_{rs} a^s \sqrt{2(E - \varphi)}. \quad (44)$$

Для того чтобы получить соотношение $\Omega=0$, надо исключить a из этих уравнений. Обозначив через a^{rs} члены детерминанта (a_{rs}) , деленные на этот детерминант, получим

$$a^r = \frac{a^{rs}a^s}{\sqrt{2(E-\varphi)}}$$

и, следовательно,

$$1 = a_{rs}a^ra^s = \frac{a^{rs}\sigma_r\sigma_s}{2(E-\varphi)}. \quad (42a)$$

Напишем это соотношение в виде

$$\Omega(\sigma, x, E) \equiv \sqrt{\frac{a^{rs}\sigma_r\sigma_s}{2(E-\varphi)}} - 1 = 0. \quad (45)$$

Из уравнений (41) и (44) найдем обобщенные импульсы

$$\sigma_r = a_{rs}\dot{x}^s$$

и

$$2T = \dot{v}^2 = a^{rs}\sigma_r\sigma_s.$$

Гамильтонова функция H в динамике будет, следовательно, иметь вид

$$H(\sigma, x) = T + \varphi = \frac{1}{2} a^{rs}\sigma_r\sigma_s + \varphi,$$

а отсюда согласно уравнению (45)

$$\Omega(\sigma, x, E) = \sqrt{\frac{H-\varphi}{E-\varphi}} - 1; \quad (46)$$

таким образом, $\Omega=0$ эквивалентно $H=E$.

Уравнения (11), полученные для Ω в оптике, дают

$$\frac{a^r}{v} = \frac{\partial \Omega}{\partial \sigma_r} = \frac{1}{2\sqrt{(H-\varphi)(E-\varphi)}} \frac{\partial H}{\partial \sigma_r}; \quad (46')$$

положив $H=E$, $2(E-\varphi)=v^2$, получим

$$\frac{\partial H}{\partial \sigma_r} = va^r = \dot{x}_r. \quad (47)$$

т. е. первую половину уравнений движения.

Другая группа уравнений, полученных для Ω в оптике,

$$-\frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial \Omega}{\partial x} \quad \text{и т. д.},$$

дает

$$-\frac{1}{v} \frac{\partial v}{\partial x^r} = \frac{\partial \Omega}{\partial x^2} = \frac{1}{2\sqrt{(H-\varphi)(E-\varphi)}} \left(\frac{\partial H}{\partial x^r} - \frac{\partial \varphi}{\partial x^2} \right) + \frac{\sqrt{H+\varphi}}{2\sqrt{(E-\varphi)^{3/2}}} \frac{\partial \varphi}{\partial x^r} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial H}{\partial x^r},$$

если положить $H=E$.

Следовательно,

$$\frac{\partial H}{\partial x^r} = -\frac{\partial v}{\partial x^r} v = -\frac{d\sigma_r}{ds} v = -\dot{a}^r \quad (48)$$

(так как $d \frac{\partial v}{\partial \alpha} = \frac{\partial v}{\partial x} dx$), и мы получаем вторую половину уравнений движения.

Рассмотренная здесь для выяснения перехода от геометрической оптики к динамике оптическая среда изотропна, так как v не зависит от направления. Таким образом, развитая Гамильтоном динамика использует лишь частные случаи его оптической теории.

Основная черта гамильтонова метода в оптике состоит в согласовании минимального принципа (принципа наименьшего действия или принципа Ферма) с каноническим преобразованием (принцип Гюйгенса), и этот фундаментальный дуализм переносится и в динамику, в которой Гамильтон, начав с хорошо известного принципа наименьшего действия, исследует уравнения движения, по существу говоря, с помощью бесконечно малого касательного преобразования²⁴.

Работы Гамильтона по теории систем лучей остались малоизвестными на континенте. Одной из основных причин этого является то, что «Transactions» Ирландской академии в Германии, Франции и России являлся редким и малодоступным журналом. Неумелая и запутанная форма изложения этих работ Гамильтона также не способствовала их распространению. Только постепенно идеи, заключенные в них, становятся известными. В Англии Максвелл²⁵, а в Германии Брунс²⁶ и Ф. Клейн²⁷ в той или иной степени в связи с работами Гамильтона продолжали развивать это направление и впоследствии методы, созданные Гамильтоном, нашли широкое применение в геометрической оптике и теории оптических приборов.

Особенно важный шаг в развитии основ обобщенной геометрической оптики сделал Г. Брунс (1848—1919) в 1895 г. в работе «Das Eikonal». Он, аналогично Гамильтону, считал, что надо выделить, как это впервые было сделано Аббе, «логически необходимые и достаточные предпосылки» этой науки. Если проделать это исследование, то совокупность общих положений геометрической оптики, о которых идет речь в теории оптических изображе-

²⁴ *F. Klein*. Ges. Math. Abh., v. 2, p. 601; *S. Lie*. Berichte Leipzig, Math.-Phys. Cl., 1896, 48, 131—133; *E. Cartan*. Leçons sur les invariants intégraux. Paris, 1922, Chaps. XVIII, XIX; *E. O. Lovitt*. Trans. Cambridge Phys. Soc., 1900, 18, 256—268; *E. Study*. Jahresber. Dtsch. Math.-Ver., 1905, 14, 421.

²⁵ *J. K. Maxwell*. On the General Laws of Optical Instruments. — In: Sci. Pap., v. 6, Cambridge, 1890, p. 271—286; On Hamilton's Characteristic Function for a Narrow Beam of Light, *ibid.*, p. 381—391; On the Relation of Geometrical Optics to Other Parts of Mathematics and Physics, *ibid.*, p. 391—393; On the Application of Hamilton's Characteristic Function to the Theory of an Optical Instrument Symmetrical about its Axis, *ibid.*, p. 439—445.

²⁶ *H. Bruns*. Das Eikonal. — Abhandl. Sächsisch. Ges. Wiss. Leipzig. Math.-Phys. Kl., 1895, 21, 325 и след.

²⁷ *F. Klein*. Über das Brunssche Eikonal. — Z. Math. und Phys., 1901, 46, 372—375; Über neuere englische Arbeiten zur Mechanik. — Ges. Math. Abh., v. 2, p. 601—602.

ний, «может быть до известной степени сведена к простому выражению: объект и изображение коллинеарны» ²⁸.

Это положение дает основание для введения некоторой функции E , которая объединяет с общей точки зрения проблемы геометрической оптики.

Эйконал E есть в общем случае функция шести переменных $x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2$. Если x_1, y_1, z_1 даны и известно начальное направление луча из уравнений

$$\frac{\partial E}{\partial x_1} = -nm_1, \quad \frac{\partial E}{\partial y_1} = -np_1, \quad \frac{\partial E}{\partial z_1} = -nq_1, \quad (49)$$

где n — коэффициент преломления среды, m, p, q — направляющие косинусы луча, то всегда можно определить координаты конечной точки x_2, y_2, z_2 .

В общем виде, следовательно,

$$n^2 = (\text{grad } E)^2. \quad (50)$$

Таким образом, эйконал определяет оптическое изображение.

Лучше всего можно уяснить себе роль, которую играет эйконал в геометрической оптике, сравнением «с другим отделом прикладной математики» ²⁹, а именно с механикой в гамильтоновой форме. В механике принцип Гамильтона играет «привилегированную» роль, которая основывается на том, что он позволяет с общей точки зрения охватить все проблемы механики. Аналогичную роль играет «понятие эйконала в гораздо более узкой области геометрической оптики. Оно (понятие эйконала. — Л. П.) дает для обобщенного рассмотрения общих вопросов простейшую математическую форму вычисления. Само собой разумеется, что при этом затруднения, которые представляет какая-либо частная задача, пока еще должны преодолеваются особыми, рассчитанными на данный случай, вспомогательными средствами» ³⁰.

Эта аналогия приобретает особый интерес, если вспомнить, что динамика Гамильтона находится в глубокой и тесной связи с его же исследованиями в области геометрической оптики. На эту сторону дела и обратил свое внимание Ф. Клейн, который аналитически установил, что эйконал равен характеристической функции Гамильтона для некоторого частного случая ³¹.

Заметим, однако, что для лучей невозможно ввести функцию, аналогичную функции Лагранжа для частиц. В самом деле, так как

$$L = p \frac{\partial H}{\partial p} - H, \quad (51)$$

то, заменяя H частотой ω , а импульс — волновым вектором $\mathbf{k}$, найдем, что в оптике функция Лагранжа будет иметь вид

$$L_{\text{опт}} = \mathbf{k} \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} - \omega = 0, \quad (52)$$

²⁸ *H. Bruns. Das Eikonal. Ibid., S. 327.*

²⁹ *Ibidem.*

³⁰ *Ibidem.*

³¹ *F. Klein. Über das Brunsche Eikonal. Z. Math. und Phys., 1901, 46, 372—375.*

так как $\omega = ck$. Впрочем, невозможность введения функции Лагранжа видна и из того факта, что распространение лучей аналогично движению частиц с нулевой массой.

В примечании к переизданию указанной заметки в своем собрании сочинений Клейн замечает, что оптика, о которой идет здесь речь, есть оптика, имеющая дело с понятием лучей. Это означает исключение явлений дифракции. Оптика лучей основана на уравнении, имеющем в прямоугольных координатах вид

$$\sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right)^2 = \frac{1}{u^2} \left(\frac{\partial \psi}{\partial t} \right)^2; \quad (53)$$

оно является дифференциальным уравнением в частных производных первого порядка второй степени. В физической оптике, охватывающей явления интерференции и дифракции, основным будет уравнение

$$\sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_i^2} \right) = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}; \quad (54)$$

которое является дифференциальным уравнением второго порядка первой степени. Различие между этими фундаментальными уравнениями, таким образом, весьма велико. Однако, как известно, последнее уравнение переходит в первое в предельном случае бесконечно малой длины волны, выражая тем самым переход физической оптики в геометрическую³².

【ВОЛНЫ Л. ДЕ БРОЙЛЯ

■ Заканчивается первая четверть XX в.

Первый важный шаг в направлении корпускулярно-волнового синтеза³³ и преодоления противоречий теории Н. Бора сделал в 1924 г. Л. де Бройль. В 1910 г. он получил *L. ès Sc. (Licencie ès Sciences)* по истории на факультете гуманитарных наук университета Парижа. Однако частью под влиянием своего брата физика М. де Бройля, частью под впечатлением книг «Ценность науки» и «Наука и гипотеза» А. Пуанкаре

³² Этот переход был прекрасно показан в 1911-г. А. Зоммерфельдом и И. Рунге, которые исходили при этом из одной идеи П. Дебая: *J. Runge, A. Sommerfeld. Anwendung der Vectorrechnung auf die Grundlagen der geometrischen Optik. — Ann. Physik, 1911, 35, 277—299.*

Подробный анализ оптико-механической аналогии и динамики Гамильтона см.: *Л. С. Полак. Вариационные принципы механики, их развитие и применение в физике. М., Физматгиз, 1960.*

³³ Мы можем здесь только упомянуть о многочисленных конкретных проблемах, решавшихся экспериментально: частица или волна. Решающие опыты М. фон. Лауэ и Книппинга о природе лучей Рентгена, природе α - и β -излучения, каналовые лучи, комптон-эффект. Уже в 1912 г. У. Брэгг писал: «...мне кажется, что проблема состоит не в том, чтобы сделать выбор между двумя теориями X-лучей, но в том, чтобы найти...теорию, которая обладает емкостью обеих» (*W. H. Bragg. X-ray and Crystals. Nature, 1912, 90, 360—361.*)

он решил изменить область своих научных интересов. В 1913 г. он получил L. ès Sc. по физическим наукам на факультете наук Сорбонны. Он продолжал там же работать (по крайней мере формально) для получения D. ès Sc. и особенно заинтересовался фундаментальными проблемами физики: пространство и время, структура материи и электромагнитной энергии.

В его теоретических исследованиях так называемых волн материи у него, как это всегда бывает, были предшественники, подходившие к тем же идеям, но не находившие еще гармонического и систематического синтеза, которые можно было проверить однозначным экспериментом. Не останавливаясь на работах (существенно спекулятивных), которых он заведомо не знал ³⁴, укажем лишь на работы М. Бриллюэна, в которых развивалась гидродинамическая модель колеблющегося атома ³⁵. Л. де Бройль назвал М. Бриллюэна «истинным предшественником волновой механики» ³⁶. М. Бриллюэн опубликовал по этому вопросу несколько статей, из которых особенно интересна третья, в которой он пытается ввести некоторую лагранжеву функцию для ближайшего окружения атомного ядра, где уравнения Максвелла, как это предположено в теории Бора, уже недействительны ³⁷.

Л. де Бройль сказал: «Я знал эту заметку. Я вспоминаю, что он мне ее послал. Да, она, конечно, сыграла некоторую роль в целом...» ³⁸ Более того, он сослался на нее в своей первой статье, в которой рассматривался вопрос о фазовых волнах ³⁹.

Интересно отметить, что М. Бриллюэн не был полностью уверен в правильности и перспективности выбранного им подхода — он закончил эту статью словами: «Может быть, существует другой... путь, на котором отважные молодые исследователи могут достигнуть успеха» ⁴⁰.

Столь важное для концепции де Бройля понятие о групповой скорости может быть прослежено уже у Стокса в 1849 г. в его «Notes on hydrodynamics» ⁴¹. Формула групповой скорости $u = \frac{dv}{d(v/v)}$ была известна Гамильтону, как это видно из его недавно опубликованных рукописей ⁴². Она была

³⁴ См. об этом: *M. Jammer. The conceptual Development of Quantum Mechanics. N. Y., 1966.* В этой прекрасной книге собран большой материал, в частности приведены многочисленные данные из «Archive for the History of Quantum Physics», который нам недоступен. Поэтому мы постарались максимально использовать данные из этого архива, приведенные в этой книге.

³⁵ *M. Brillouin. Actions mecaniques à hérédité discontinue par propagation; essai de Théorie dynamique de l'atome à quanta. Compt. rend., 1919, 168, 1318—1320; Actions à hérédité discontinue et raies spectrale, 1919, 168, 1318—1320; 1920, 171, 1000—1002.*

³⁶ *L. de Broglie. Electrons et Photons-Rapports et Discussions du Cinquième Conseil de Physique tenu à Bruxelles du 24 au 29 Octobre 1927 sur les Auspices de l'Institut International de Physique Solvay. Paris, 1928, p. 105.*

³⁷ *M. Brillouin. Atome de Bohr-Function de Lagrange Circumnucéaire. — J. phys., 1922, 3, 65—73.*

³⁸ *Archive for the History of Quantum Physics. Interview with L. de Broglie on 7 Jan. 1963.*

³⁹ *L. de Broglie. Ondes et Quanta. — Compt. rend., 1923, 177, 507—510.*

⁴⁰ *M. Brillouin. Ibid., p. 73.*

⁴¹ *G. G. Stokes. Cambridge and Dublin Math. Journ., 1849, 4, 219—240.*

⁴² *W. R. Hamilton. Math. Pap., v. 1, Cambridge Univ. Press, 1931.*

впервые опубликована в 1877 г. Рэлеем ⁴³. Самое раннее экспериментальное доказательство этой формулы дал А. Майкельсон в работе «Determination of the velocity of light, and of the difference of velocities of red and blue light, in carbon disulfide» ⁴⁴.

Термин «фазовая волна» появился впервые в работе де Бройля «Quanta de lumière, diffraction et interférences» ⁴⁵. После ряда статей 1922—1924 гг. ⁴⁶ Л. де Бройль обобщил и систематически изложил свою концепцию в тезисах своей докторской диссертации, которую он представил 29 ноября 1924 г. факультету наук университета Парижа ⁴⁷. Полное изложение этой работы было опубликовано годом позже ⁴⁸.

Комиссия высоко оценила оригинальность работы, но все же не поверила в реальность существования волн де Бройля. На вопрос Перрена, как можно будет экспериментально доказать их существование, де Бройль ответил, что это возможно сделать в опытах по дифракции электронов.

Работа заинтересовала многих и особенно ученых континуальных «полевых» воззрений. Ланжевен сказал де Бройлю: «Я говорил о ваших тезисах Эйнштейну, они его заинтересовали, он хотел бы иметь экземпляр» ⁴⁹.

Работа состояла из семи глав: 1. Фазовая волна; 2. Принципы Мопертюи и Ферма; 3. Квантовые условия устойчивости траекторий; 4. Квантование одновременного движения двух электрических центров; 5. Квант света; 6. Диффузия X- и γ -лучей; 7. Статистическая механика и кванты. Кроме того, в работе содержалось большое и чрезвычайно интересное историческое введение о корпускулярном и волновом аспектах теорий света и частиц. Она заканчивалась следующими словами: «Я нарочно дал довольно неотчетливые определения фазовой волны и периодического явления, которое она, так же как и кванты света, некоторым образом выражает. Настоящую теорию нужно, таким образом, рассматривать скорее как форму, физическое содержание которой не вполне установлено, чем как окончательно разработанную стройную теорию» ⁵⁰.

⁴³ Дж. Ст. Рэлей. Теория звука. Т. 1. М., 1944, § 191.

⁴⁴ A. A. Michelson. Astron. Papers prepared for the Use of the American Ephemerides and Nautical Alman., v. 2, 1885.

⁴⁵ L. de Broglie. Compt. rend., 1923, 177, 548—550.

⁴⁶ Библиографию этих работ см.: Луи де Бройль. По тропам науки. М., ИЛ, 1962, с. 371—376. Статья «Попытка построения теории световых квантов» помещена в сб.: Вариационные принципы механики, 1959, с. 631—641.

⁴⁷ Thèses présentées à la Faculté des Sciences de l'Université de Paris pour obtenir le grade de docteur des sciences physiques par Louis de Broglie, première thèse: Recherches sur la théorie des quanta, deuxième thèse: Propositions données par la Faculté, soutenues le 29 novembre, 1924, devant la Commission d'examen: J. Perrin, Président; E. Cartan, Ch. Mauguin, P. Langevin, Examineurs.

⁴⁸ L. de Broglie. Recherches sur la théorie des quanta. Ann. phys., dixième série, 1922, 3, 22—128. Перевод этой основной статьи (за исключением разделов 4—7) помещен в сб.: Вариационные принципы механики, 1959, с. 641—668.

⁴⁹ Archive. . . Interview with L. de Broglie on 7.VI 1963.

⁵⁰ Л. де Бройль. Исследования по теории квантов. Сб.: Вариационные принципы механики, с. 667.

Мы не будем здесь сколько-нибудь подробно рассматривать работы де Бройля, так как изложение их можно найти в любой книге по квантовой физике или квантовой механике, а авторское изложение — в переведенных на русский язык статьях⁵¹. Дополнительный анализ можно найти в книгах⁵². Здесь укажем лишь на основные идеи концепции Л. де Бройля.

Де Бройль руководствовался «мыслью о глубоком тождестве принципа наименьшего действия и принципа Ферма» и пришел к допущению, что «динамически возможные траектории движущегося тела (для системы с заданной энергией. — Л. П.) совпадают с возможными лучами фазовой волны»⁵³. Этой идеей непосредственно определяется путь исследования. «С одной стороны, мы исследуем механический принцип наименьшего действия в его классических формах Гамильтона и Мопертуои и в релятивистской динамике, а с другой стороны, с очень общей точки зрения, — распространение волн и принцип Ферма. В этом случае нам придется представить себе некоторый синтез этих двух исследований, синтез может быть спорный, но теоретическое изыскание его неоспоримо»⁵⁴.

Основная задача состоит в том, чтобы из волновой теории получить выражение для групповой скорости, которое будет представлять скорость луча в корпускулярной теории.

Основные идеи теории де Бройля, хотя и в весьма недоработанной и путаной форме, изложены в статье «Попытка построения теории световых квантов»⁵⁵. В интересующем нас аспекте он там говорит: «Лучи фазовой волны совпадают с динамически возможными траекториями». В основной работе «Исследования по теории квантов»⁵⁶ де Бройль пишет, что, «по-видимому, настал момент попытаться объединить корпускулярные и волновые представления и несколько углубить понимание истинной сущности кванта». Вместе с тем такое рассмотрение позволит углубить и понимание того физического объекта, который классическая физика называла корпускулой. Синтез корпускулярных и волновых представлений должен быть универсальным.

По де Бройлю, каждая частица сопряжена с «внутренним периодическим явлением» с частотой $\nu_0 = \frac{1}{h} m_0 c^2$. Для неподвижного наблюдателя частота будет $\nu_0 \sqrt{1 - v^2/c^2}$. Предположив, что волна частоты

$$\frac{E}{h} = \frac{1}{h} \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (55)$$

⁵¹ Л. де Бройль. Исследования по теории квантов. Попытка построения теории световых квантов. Там же, с. 631—640, 641—667.

⁵² М. Jammer. The conceptual Development of Quantum Mechanics, N. Y., 1966, p. 236—247. Сб.: Вариационные принципы механики, с. 780—880; Л. С. Полак. Вариационные принципы механики, их развитие и применение в физике, 1960, гл. 7.

⁵³ L. de Broglie. Recherches sur la théorie de quanta. Ann. phys. (10), 1925, 3, 45; в сб.: Вариационные принципы механики, с. 652.

⁵⁴ Там же, с. 653.

⁵⁵ L. de Broglie. Philos. Mag. and J. Sci., 1924, 47, N 278, с. 446; в сб.: Вариационные принципы механики, с. 631—640.

⁵⁶ L. de Broglie. Ann. phys. (10), 1925, 3, 22—128.

связана с частицей, он показал, что эти два явления всегда будут в фазе, если предположить скорость волны равной c^2/v . Отсюда длина волны

$$\lambda = \frac{h}{m_0 v / \sqrt{1 - v^2/c^2}} = \frac{h}{p}. \quad (56)$$

Для групповой скорости ⁵⁷ u этих волн получаем

$$u = \frac{dv}{d(1/\lambda)} = \frac{d \frac{1}{h} \left(\frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \right)}{d \frac{1}{h} \left(\frac{m_0 v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \right)} = v. \quad (57)$$

Предположив, что уравнение Планка $\varepsilon = h\nu$ и соотношения $\lambda = h/p$ выполняются и в потенциальном поле, де Бройль показывает, что пути частиц совпадают с лучами волн. Для доказательства этого запишем принцип Ферма в виде

$$\delta \int \frac{ds}{v\lambda} = 0, \quad (58)$$

или, так как v должна рассматриваться как постоянная при вариации (условие необходимое, если скорость волн зависит от частоты), то

$$\delta \int \frac{ds}{\lambda} = 0,$$

или

$$\delta \int \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} ds = 0. \quad (59)$$

Принцип наименьшего действия в обычной форме

$$\delta \int p ds = 0,$$

или

$$\delta \int \frac{m_0 v}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = 0 \quad (60)$$

определяет ту же траекторию, что и принцип Ферма.

Взяв квантовое условие Бора—Зоммерфельда

$$\oint p dq = nh$$

⁵⁷ Понятие группы волн или волнового пакета впервые применил в оптике П. Дебай в 1909 г., а несколько позже, в 1914 г., М. Лауэ для точного аналитического представления пучков лучей. Это понятие впоследствии использовал Шредингер для того, чтобы связать волновую механику с обычной механикой материальной точки (*P. Debye. Ann. Physik, 1909, 30, 755; M. von Laue. Ann. Physik, 1914, 44, 1197*).

и подставив в него значение p , согласно гипотезе де Бройля получим

$$\oint \frac{dq}{\lambda} = n. \quad (61)$$

Этим уравнением утверждается, что путь должен содержать целое число длин волн или что после полного оборота фаза волн не должна изменяться⁵⁸.

Такое объяснение, однако, вызывает справедливые возражения, так как согласно этому объяснению введенные в рассмотрение волны не имеют объема и существуют только вдоль орбиты.

Основное значение полученного результата состоит в том, что здесь реализована «идея глубокой связи между двумя главными принципами геометрической оптики и динамики»⁵⁹. Эта идея может и должна быть «драгоценным проводником для того, чтобы реализовать синтез волн и квантов».

Все дальнейшее исследование основывается на том, что принцип наименьшего действия в форме Лагранжа и принцип Ферма «весьма вероятно могут быть двумя аспектами одного и того же закона»⁶⁰, причем, как известно, «аналогия между старой механикой и геометрической оптикой подтверждалась тем фактом, что при приближениях геометрической оптики движение группы волн выражается уравнениями, сходство которых с уравнениями теории Якоби чрезвычайно велико»⁶¹. Конечно, как замечает сам де Бройль в основной работе, «идея, что за движением материальной точки всегда скрывается распространение волны, должна быть изучена и дополнена, но если удастся найти для нее совершенно удовлетворительную форму, то она представит собой синтез большой рациональной красоты»⁶².

Воспользовавшись оптико-механической аналогией и сформулировав ее на основе математического аппарата теории относительности, де Бройль получил уравнения, которые позволили развить основные гипотезы его теории. Наряду со столь характерной для физики XIX в. аналогией по форме явлений, мы находим у де Бройля элементы аналогии нового типа. Модельная аналогия является известного рода гипотезой, вытекающей из общей идеи связи волнового и корпускулярного аспектов движения. Оптико-механическая аналогия Гамильтона, которая основывалась на совпадении форм законов движения механической частицы и луча, как нормали к волновой поверхности, не отождествляла этих двух процессов. Она как бы намекала на возможную связь движения частицы с движением волны. На основе вновь возникшей в XX в. controversy волна—корпускула де Бройль в отождествлении принципов Ферма и Эйлера—Лагранжа находит выражение необходимой связи волны и корпускулы, «синтез» волновых и корпускулярных представлений. Ибо, «если в теории света в течение столетия слишком пренебрегали понятием «частицы» для того, чтобы пользоваться исключительно понятием «волны», не была ли допущена обратная ошибка

⁵⁸ См. также: J. L. Synge. Geometrical mechanics and de Broglie waves. Cambridge, 1954.

⁵⁹ L. de Broglie. Ann. phys., p. 56.

⁶⁰ Ibid., p. 126.

⁶¹ Л. де Бройль. Введение в волновую механику, Гостехиздат Украины, 1935, стр. 67.

⁶² L. de Broglie. Recherches sur la théorie des quanta. — Ann. phys. (10), 1925, 3, 126.

в теории материи? Были ли вправе физики пренебрегать понятием «волны» и думать только о понятии «частицы»? Эти вопросы задал себе несколько лет назад автор (де Бройль. — Л. П.), обдумывая аналогию между принципом наименьшего действия и принципом Ферма в поисках смысла таинственных квантовых условий, введенных во внутриатомную динамику Планком, Бором, Уилсоном и Зоммерфельдом»⁶³.

Статья де Бройля «Исследования по теории квантов» представляет собой блестящий пример роли физической интуиции. Логическая структура этой работы во многом неудовлетворительна: например, переход от равенства $O_4 = \frac{1}{h} J_4$ к равенству $O = \frac{1}{h} J$, получение нерелятивистских соотношений из релятивистских и т. п. Несмотря на это, де Бройль получил правильные результаты, открывшие новую эпоху в развитии физики.

Существенно отметить, что отсутствие достаточных экспериментальных данных и сколько-нибудь разработанных теоретических предпосылок и понятий, невозможность построить логически замкнутую схему атомной теории, исходя из принципов классической макроскопической физики, привели к специфической черте работы де Бройля: содержащийся в ней исторический обзор имеет своей задачей не столько осветить развитие и состояние вопроса, сколько в какой-то степени обосновать анализом историко-научных данных основные идеи работы де Бройля и их математическую формулировку (напомним, что де Бройль по образованию — историк).

Так как такого рода историко-научный подход к физическим проблемам есть весьма интересный и своеобразный вариант столь широко применяемого в физике метода аналогий, то и с этой точки зрения в полном смысле слова неповторимая работа де Бройля представляет особый интерес.

Вот как изложил физическое содержание концепции де Бройля М. Планк: «В то время как классическая физика совершает пространственное разделение рассматриваемого образа на его мельчайшие части и таким путем сводит движение любого материального тела к движениям его отдельных, предполагаемых неизменяемыми материальных точек, квантовая физика разлагает каждый процесс движения на отдельные периодические волны материи. Последние отвечают собственным колебаниям и собственным функциям данного образа и вследствие этого ведут к волновой механике. Поэтому по классической механике простейшее движение — движение отдельной материальной точки, по квантовой механике — движение простой периодической волны»⁶⁴.

⁶³ Л. де Бройль. Введение в волновую механику. Укр.гостехиздат, 1935, с. 8.

⁶⁴ М. Планк. Картина мира современной физики. — Усп. физ. наук, 1929, 9, вып. 4, 421.

ВОЛНОВАЯ МЕХАНИКА Э. ШРЕДИНГЕРА

Начало второй четверти XX в.

Настроение многих физиков-теоретиков накануне грандиозного научного взрыва — создания квантовой механики — хорошо видно из письма В. Паули Р. Кронигу, датированному 21 мая 1925 г.: «Физика теперь снова зашла в тупик, во всяком случае для меня — она слишком трудна, и я предпочел бы быть комиком в кино или кем-нибудь вроде этого и не слышать ничего о физике!»⁶⁵.

А. Иоффе вспоминает о своих встречах в 1924 г. на Сольвеевском конгрессе: «Лоренц, создатель электронной теории, мог только выразить свое сожаление, что он не умер лет на пять раньше, когда горизонт этой теории был еще ясным. Ланжевен говорил о тезисах Л. де Бройля как об интересной попытке синтеза, о возможном выходе из тупика»⁶⁶.

В это же время уравнение, которое описывало бы волны де Бройля, искал Дебай⁶⁷ путем аналогии с уравнением Гамильтона—Якоби; Маделунг пытался построить «волновую теорию атомных уравнений»⁶⁸. Однако только Эрвину Шредингеру (1887—1961) удалось это сделать, причем в течение нескольких месяцев.

Сложный образ почти сорокалетнего ученого⁶⁹ в 1925—1926 гг. определяется многими взаимодействующими и взаимоисключающими факторами.

Этот великий физик был в равной мере знатоком биологии и многих других областей естествознания, любил поэзию и сам писал стихи, был превосходно знаком с классическим и новым искусством, пробовал свои силы как скульптор, цитировал древних греческих философов в своих лекциях по теоретической физике, переводил Гомера с подлинника на английский язык и провансальских поэтов на немецкий, выпустил в свет книгу стихов.

Вот перечисление тех областей физики, которым в основном посвящены его научные труды: 1. Статистическая механика (статистическая термодинамика, теория вероятностей, магнетизм, броуновское движение, диэлектрики, теплоемкость), 2. Квантовая механика (волновая механика, спектроскопия, факторизация, теория Дирака, теория мезонов, квантовая теория измерений, интерпретация квантовой механики), 3. Структура пространства

⁶⁵ Р. Крониг. Переломные годы. — В сб.: Теоретическая физика XX века (памяти Вольфганга Паули). М., ИЛ, 1962, с. 34.

⁶⁶ А. Joffe. A la Mémoire d'un maître et ami. La Pensée. — Rev. rationalisme moderne. 1947, N 12, 15—16.

⁶⁷ Archive for the History of Quantum Physics. Interview with P. S. Epstein on 26 May 1962.

⁶⁸ Ibid. Interview with L. Landé on 6 Mar. 1962. См. автобиографию Э. Шредингера на с. 343—346 наст. изд.

⁶⁹ Когда вышли в свет основные работы Эйнштейна, ему было 26 лет, Бору — 28, Паули — 25, Гейзенбергу — 24, Дираку — 24, а Шредингеру — 39 лет. Борн пишет: «Что существует более выдающегося в теоретической физике, чем его первые шесть работ по волновой механике?» (См. в сб.: Э. Шредингер. Новые пути в физике. М., «Наука», 1971, с. 384).

времени (общая теория относительности, аффинные связи, единая теория поля, космология, межпланетные поля), 4. Проблемы различных областей физики (радиоактивность и космические лучи, акустика, поверхностное натяжение, классическая динамика, интерференция рентгеновых лучей, теория цвета, электродинамика, оптика, сверхпроводимость).

Отметим влияние на Шредингера идей и личности Л. Больцмана.

Влияние статистических идей и методов, развитых Л. Больцманом и заложивших основы статистической физики, на Шредингера было исключительно большим и простиралось далеко за пределы частных задач в область методологии физики. Так, например, до открытия волновой механики (по крайней мере в 1924 г.) Шредингер весьма одобрительно относился к статистическому толкованию квантовых процессов, выдвинутому в известной статье Бора—Крамерса—Слетера (*Phys. Mag.*, 1924, 47, 785). Об этом свидетельствует статья Шредингера, на которую он ссылается (*Bohr's neue Strahlungshypothese und Energiesatz. — Naturwissenschaften*, 1924, 12, 720) в работе «Закон сохранения энергии-импульса волн материи» (см. наст. изд., с. 145). В дальнейшем, в процессе развития идей Эйнштейна и де Бройля и тем более после открытия волновой механики и электродинамического истолкования квадрата волновой функции, Шредингер изменил свою точку зрения. Даже последовательно развитая Борном вероятностная интерпретация не казалась ему убедительной (см. наст. изд., с. 160). Слишком уж далека эта интерпретация по своему физическому смыслу от статистики молекул газа, разработанной Максвеллом, Больцманом, Гиббсом.

Огромное влияние Больцмана на Шредингера может быть легко показано анализом ранних работ последнего по кинетической теории газов, статистической механике и теории упругости⁷⁰. В начальный период своей научной работы, изучая физику непрерывных сред, он ознакомился с проблемой собственных значений, что сыграло немалую роль в его исследованиях 1925—1926 гг. Он интенсивно изучал «Теорию звука» Рэля и оценил важную роль понятия групповой скорости⁷¹. В своей книге «*Meine Weltansicht*»⁷² он пишет, что в это время глубоко интересовался философией и читал творения Спинозы, Шопенгауэра, Маха, Р. Семона, Р. Авенариуса.

В перечисленном списке имен философов нам оказалось неизвестным (так же, как, вероятно, многим читателям-физикам) имя Р. Семона. В БСЭ о нем имеется справка, которую мы приводим с небольшими сокращениями: «Р. Смон (1859—1918) — немецкий зоолог, автор работ по эмбриологии иглокожих и позвоночных. Наибольшую известность приобрели работы Семона по теоретической биологии, в которых он выступал как психолamarкист. Признавая наследование особенностей, приобретаемых в течение жизни организмом, Смон развивал теорию, согласно которой в основе наследственности лежит так называемая клеточная память, однозначная памяти психических процессов»⁷³.

⁷⁰ См. список трудов Э. Шредингера с. 413—418 наст. изд., № 2, 3, 8, 11, 15, 19, 20, 21.

⁷¹ E. Schrödinger. Zur Akustik der Atmosphäre. *Phys. Z.*, 1917, 18, 445—454.

⁷² E. Schrödinger. *Meine Weltansicht*. Vienna, 1961, S. 8.

⁷³ БСЭ. Изд. 2-е. 1955, т. 38, с. 489.

Вот что говорит сам Шредингер:

«Старый венский институт Людвиг Больцмана, незадолго до моего появления так трагически ушедшего из жизни, где трудились Фриц Хазенёрль и Франц Экснер ⁷⁴ и через который прошли многие другие ученики Больцмана, дал мне возможность проникнуться идеями этого могучего ума. Круг этих идей стал для меня как бы первой любовью в науке, ничто другое меня так не захватывало и, пожалуй, никогда уже не захватит. К современной теории атома я приближался очень медленно. Ее внутренние противоречия звучат как пронзительные диссонансы по сравнению с чистой, неумолимо ясной последовательностью мысли Больцмана. Было время, когда я прямо-таки готов был обратиться в бегство, однако, побуждаемый Экснером и Кольраушем, нашел спасение в учении о цвете. Чтобы путем радикальной перестройки вернуться хотя бы к прежней ясности в теории атома, мной были проверены и отброшены многие свои и чужие исследования. Известное облегчение впервые доставила мне идея де Бройля об электронных волнах, которые я использовал для построения волновой механики. Однако мы еще довольно далеки от действительного постижения того понимания природы, которое подготовлено, с одной стороны, волновой механикой, а с другой — квантовой механикой Гейзенберга» ⁷⁵.

Хазенёрль отводил в своих лекциях по теоретической физике основное место механике Гамильтона и задаче собственных значений в теории сплошных сред.

Не случайно много лет спустя Шредингер писал, что если бы не трагическая гибель Хазенёрля, то «его имя звучало бы сегодня вместо моего» ⁷⁶.

Большое влияние на формирование мировоззрения Шредингера оказала книга Франца Экснера «Vorlesungen über die physikalischen Grundlagen der Naturwissenschaften», написанная в 1917 г. и вышедшая в свет в 1919 г. Четвертая часть ее посвящена вопросу о законах природы (Über Naturgesetz). Экснера больше всего интересовал вопрос о том, являются ли законы физики точными и абсолютными, приложимыми строго ко всем случаям, везде, для всех интервалов времени. Шредингер изложил этот раздел книги

⁷⁴ Хазенёрль Ф. (1874—1915) — австрийский физик, погиб на фронте во время первой мировой войны. Основные работы по термодинамике (под сильным влиянием Л. Больцмана) и квантовой теории. В 1904 г., рассматривая излучение в замкнутой полости, формулировал для этого случая эквивалентность массы и энергии. (Эйнштейн, который сформулировал ее в самом общем виде, не знал работы Хазенёрля.) Последние годы жизни занимался вопросами соотношения статистической механики и старой квантовой теории. Издал в трех томах «Wissenschaftliche Abhandlungen» Л. Больцмана. Экснер Ф. (1849—1926) — австрийский физик. Изучал атмосферное электричество, спектроскопию, электрохимию, теорию цветов Гельмгольца. Интересовался общими, методологическими вопросами физики (см. его книгу, упомянутую в тексте).

⁷⁵ Вступительная речь Э. Шредингера в Прусской академии наук 4-го июля 1929 г. Наст. изд., с. 339. Интересно отметить, что осенью 1898 г. Шредингер поступил в хорошо известную академическую гимназию в Вене, в которой до него учились Л. Больцман и Стефан Цвейг.

⁷⁶ Наст. изд., с. 344.

Экснера в своей вступительной лекции в Цюрихе в 1922 г., но опубликовал эту лекцию лишь в 1929 г.⁷⁷

Исключительно важное значение для работы Шредингера в области волновой механики имел постоянный контакт с замечательным математиком и многогранным ученым Г. Вейлем, который в то время работал в Цюрихе⁷⁸. Недаром почти во всех основных статьях Шредингера этого времени (1926—1927 гг.) мы находим выражения его благодарности Вейлю за непосредственную помощь в разработке методов решения, указания на состояние соответствующих математических проблем и рекомендацию литературы⁷⁹. В этом плане помощь Вейля была, пожалуй, одним из существеннейших факторов, способствовавших столь необыкновенной вспышке творческой активности Шредингера.

Нельзя не отметить, что стиль исследований Вейля, в частности в области теории относительности и создании единой теории поля, отразился на работах Шредингера. Этот вопрос недостаточно еще изучен в историко-научной литературе, но, безусловно, представляет большой интерес⁸⁰.

Существенным для блестящего продвижения Шредингера в его основных работах было и то, что в 1924 г. вышла в свет книга Р. Куранта и Д. Гильберта «Методы математической физики», где была изложена математическая теория, необходимая для решения уравнений типа уравнения Шредингера.

Кроме этих основных влияний, на творческой активности Шредингера в разработке волновой механики сказались и другие факторы, связанные с некоторыми особенностями развития атомной физики в 1923—1924 гг.

В интересной статье⁸¹ детально рассматривается вопрос о том, почему именно Шредингер развил волновую концепцию де Бройля. Изучение

⁷⁷ E. Schrödinger. Was ist ein Naturgesetz? — Naturwissenschaften, 1929, 17, 9—11.

⁷⁸ В 1921 г. Шредингер получил в Цюрихе кафедру, которую до него занимали Эйнштейн и Лауэ. За несколько лет до этого Шредингер провел один семинар в Йене в качестве ассистента М. Вина.

⁷⁹ Еще в 1922 г. Шредингер применил теорию пространства-времени Г. Вейля к теории атома Бора (наст. изд., с. 161). Хотя это направление не получило развития в позднейших работах Шредингера, но влияние «полевых» идей (в данном случае связанных с одним из вариантов так называемых единых теорий поля) может быть отмечено в некоторых попытках интерпретации им физического смысла функции ψ .

⁸⁰ Очень интересная параллель может быть также проведена между М. Планком и Э. Шредингером. Оба сделали свои создавшие эпоху работы в возрасте около 40 лет, оба по своему духу — классические физики, с той лишь разницей, что Шредингер — последователь Л. Больцмана, а М. Планк «шел к нему с боями», оба, создав новое, принципиально неклассическое (персонифицированное в h и ψ) в физике, многие годы стремились вернуть это новое в «классическое русло». Это хороший пример того, что переломные открытия делаются не только молодыми учеными (прежде всего не обремененными грузом традиций), но и учеными, выросшими в кругу представлений, отвергаемых их же открытиями. Только для последних ломка привычной научной идеологии порой оказывается подлинной «научной трагедией». (О М. Планке см., например, статью Л. С. Полака «М. Планк и возникновение квантовой физики» в книге: М. Планк. Избранные труды. М., «Наука», 1975). См. также с. 343—346 наст. изд.

⁸¹ V. V. Raman, P. Forman. Why was it Schrödinger who developed de Broglie's ideas? Historical Studies in the physical Sciences. Ed. by R. McCormach. V. 1. Philadelphia, 1969, p. 291—314.

первоисточников, переписки, материалов Архива по истории квантовой физики Американского философского общества привело авторов статьи к следующим выводам:

1. Серия работ де Бройля, написанных в большинстве случаев в соавторстве с А. Довийе (А. Dauvillier) в 1921—1923 гг. по теоретической спектроскопии и периодической системе элементов, оказавшихся ошибочными, отрицательно повлияла на его научную репутацию среди теоретиков геттингенской, мюнхенской и копенгагенской школ атомной физики. Шредингер, который в это время находился в Цюрихе и не принадлежал ни к одной из этих школ, а также не занимался детально вопросами атомной спектроскопии, по-видимому, менее других был предубежден против идей де Бройля.

2. Уже к 1923 г. в атомной физике наметились два подхода, которые впоследствии привели к разделению теоретиков квантовой механики на два лагеря: копенгагенскую школу (Бор, Борн, Гейзенберг, Паули и др.) и значительно меньшую группу ее не менее авторитетных противников (Эйнштейн, де Бройль, Шредингер). Вопросы, по которым расходились эти группы еще до открытия квантовой механики, сводились к следующим: признание реального существования световых квантов, соотношение пространственно-временного и причинного описания явлений микромира и т. д. Оказалось, что и де Бройль, и Шредингер в решении этих программных вопросов принадлежали к одному лагерю.

3. Интересы Шредингера и де Бройля во многом совпадали: их в равной мере привлекали и проблемы атомной спектроскопии, и проблемы квантовой статистики; оба считали необходимым использование релятивистского подхода к задачам атомной физики; оба высоко ценили оптико-механическую аналогию и связанный с ней вариационный подход (заметим, что интерес к оптико-механической аналогии имелся у Шредингера до его знакомства с работами де Бройля).

4. Особое значение имела статья Шредингера, опубликованная в 1922 г. «Об одном замечательном свойстве квантовых траекторий электрона» (см. с. 131 наст. изд.), в которой на основе единой теории поля Вейля была сделана попытка понять свойство целочисленности электронных орбит, частично предвосхитившая интерпретацию квантовых условий Бора—Зоммерфельда де Бройлем.

Важнейшая роль Эйнштейна в восприятии Шредингером идей де Бройля была особенно ясно обрисована в статье⁸². Сам Шредингер в письме к Эйнштейну от 23 апреля 1926 г. писал: «...все это дело (имеется в виду первое сообщение Шредингера. — Л. П.) не возникло бы ни теперь, ни когда-либо позже (я имею в виду свое участие), если бы Вы в Вашей второй статье о квантовой теории газов⁸³ не щёлкнули меня по носу, указав на важность идей де Бройля»⁸⁴. В этой связи следует отметить, что серии статей по волновой

⁸² М. Клейн. Эйнштейн и дуализм волны-частицы. — В кн.: Эйнштейновский сборник. М., «Наука», 1966.

⁸³ А. Эйнштейн. Собр. науч. трудов. Т. 3. М., «Наука», 1966, с. 489.

⁸⁴ Наст. изд., с. 161.

механике предшествовала работа Шредингера «К Эйнштейновской теории газа»⁸⁵, в которой было подчеркнуто фундаментальное значение волновой концепции де Бройля в понимании статистики Бозе—Эйнштейна.

Изложив известные уже результаты о волновых и корпускулярных аспектах в работах Планка об излучении и Эйнштейна о теории газов, Шредингер заключает: «... это означает не что иное, как принятие всерьез волновой теории де Бройля — Эйнштейна движущихся частиц, согласно которой эти частицы представляются в виде некоторых «пенных гребней» («*Schaumkamm*») на фоне образующих их волн излучения»⁸⁶.

Именно на эту свою статью ссылается Шредингер, говоря, что первое сообщение «Квантование как задача о собственных значениях» следует считать «как бы обобщением рассуждений, приведенных в связи с упомянутой газовой моделью».

С другой стороны, Шредингер в письме А. Ланде от 16 ноября 1925 г., т. е. за месяц до окончания работы «К Эйнштейновской теории газа», писал: «Я сделал тщетную попытку построить картину фазовой волны электрона на эллиптической орбите»⁸⁷. Это говорит о том, что связующим звеном между идеями де Бройля и волновой механикой Шредингера были не только работы Эйнштейна по статистике, но и попытки самого Шредингера понять спектроскопические закономерности атомной физики. Попытки эти восходят к упомянутой уже статье Шредингера 1922 г., написанной еще до публикации известных исследований де Бройля.

О внешней обстановке⁸⁸, в которой Шредингер начал свою работу по волновой механике, рассказывает Дебай: «Тогда де Бройль опубликовал свою работу. В это время Шредингер получил мою кафедру в Цюрихском университете, а я был в Техническом университете, который является федеральным институтом, и мы проводили совместный семинар. Мы говорили о теории де Бройля и согласились в том, что мы ее не понимаем и что мы

⁸⁵ *E. Schrödinger. Zur Einsteinschen Gastheorie. — Phys. Z., 1926, 27, 95—101.* Статья поступила в журнал 15.XII 1925 г., а первое сообщение «*Quantisierung als Eigenwertproblem*» — 27.I 1926 г.

⁸⁶ *Ibid.*, S. 95.

⁸⁷ Цит. по статье: *V. V. Raman, P. Forman, p. 313.* (См. ⁸¹).

⁸⁸ Обстановка социальной и научной жизни (в физических науках) выразительно охарактеризована в книге В. Т. Скотта: «Молодость Шредингера совпала с концом эпохи европейской цивилизации — «*Golden Age of Security*», как назвал ее Стефан Цвейг. Классические идеалы были окружены ореолом; мудрость стариков предпочиталась динамической энергии молодых. Новые идеи принимались неохотно, пока политические события 1914 г. не опрокинули старый порядок и не внесли повсюду ферменты социальных и политических перемен. В физике юность Шредингера также совпала с концом эпохи, которую мы теперь называем классическим периодом. В XIX веке теория электромагнитного поля Максвелла, казалось, сделала полной структуру ньютоновской физики. ... Все же ... в это время был открыт электрон, X-лучи, радиоактивность, изотопы, квантовые идеи для излучения и фотоэлектричества и специальная теория относительности. Радикальные изменения в основных идеях физики стали необходимы, и открылись совершенно новые области исследования» (*W. T. Scott. Erwin Schrödinger. An Introduction in his Writings. Mass. Univ. Press., 1967, p. 19.*)

должны подумать о его формулировках и о том, что она реально означает. Тогда я предложил Шредингеру провести коллоквиум. И приготовления к нему подтолкнули его начать работу. Прошло всего несколько месяцев между этим разговором и его публикациями»⁸⁹.

В результате всей этой совокупности обстоятельств Шредингер, так сказать, на едином дыхании менее чем за год создал «волновую механику» атома. Первое сообщение цикла статей под общим названием «Квантование как задача о собственных значениях» поступило в редакцию «*Annalen der Physik*» 27 января 1926 г., второе — 23 февраля 1926 г., третье — 10 мая 1926 г., четвертое и последнее — 21 июня 1926 г. В течение этого же времени в «*Naturwissenschaften*» была напечатана статья «Непрерывный переход от микро- к макромеханике», а в тех же «*Annalen der Physik*» — статья «Об отношении квантовой механики Гейзенберга—Борна—Иордана к моей» (поступила в редакцию 18 марта 1926 г.).

Статьи о комптон-эффекте, законе сохранения энергии-импульса и обмене энергией поступили в редакцию соответственно 30 ноября 1926 г., 10 декабря 1926 г. и 10 июня 1927 г.

Как же создавался этот замечательный цикл работ? Шредингер сам рассказал о ходе развития своих идей и их математического выражения на этой стадии П. Дираку: «Он мне рассказывал, каким путем он пришел к своему крупному открытию. При работе над спектрами он использовал, конечно, орбитальную теорию Бора, но всегда чувствовал, что квантовые состояния в этой теории неудовлетворительны и что в действительности атомные спектры должны определяться своего рода задачей собственных значений. В 1924 г. де Бройль опубликовал работу о волнах, связанных с движением свободных частиц. Эта работа оказала глубокое влияние на Шредингера, и он взялся за попытку обобщения волн де Бройля на несвободные частицы. В конце концов он получил ясное решение проблемы, сводящее появление энергетических уровней к собственным значениям некоторого оператора. Он немедленно применил свой метод к электрону в атоме водорода, правильно учитывая релятивистскую механику для движения электрона так, как это делал де Бройль. Результат не совпал с наблюдениями. Теперь мы знаем, что метод Шредингера вполне корректен и что расхождение обязано исключительно тому, что в своих расчетах он не учел спин электрона. Но в то время спин электрона не был известен. Шредингер был сильно разочарован; он решил, что его метод непригоден и оставил его. Лишь через несколько месяцев он вернулся к нему и тогда заметил, что при нерелятивистской трактовке электрона его метод дает результаты, согласные с наблюдениями в нерелятивистском приближении. Он подробно изложил все это в статье, опубликованной в 1926 г. В этом позднейшем варианте и предстало перед миром волновое уравнение Шредингера»⁹⁰.

⁸⁹ *Peter J. W. Debye. An Interview with the participation of E. E. Salpeter, D. R. Corson and S. H. Bauer. — Science, 1964, 145, 554—559.*

⁹⁰ *П. А. М. Дирак. Профессор Эрвин Шредингер. — В кн.: Э. Шредингер. Новые пути в физике. М., «Наука», 1971, с. 387—388.*

Другими словами, Шредингер сначала нашел уравнение, которое в настоящее время обычно называют уравнением Клейна—Гордона и которое, может быть, правильнее было бы называть релятивистским уравнением Шредингера.

Эйнштейн воспринял теорию Шредингера с «энтузиазмом», Планк говорил, что «я читал эти работы Шредингера, как ребенок читает головоломку», Зоммерфельд был восхищен⁹¹. Представители же геттингенской школы были настроены гораздо более сдержанно.

Нильс Бор, который со свойственным ему стремлением к обобщению и поиску глубокого физического смысла, с огромным увлечением обсуждал и разрабатывал проблемы теории атома, не мог, конечно, пройти мимо контроверзы двух подходов в этой теории.

Вот как разворачивались события в середине и осенью 1926 г. в Мюнхене и Копенгагене.

Гейзенберг рассказывает: «В июле (1926 г.) я навестил своих родителей в Мюнхене и присутствовал на докладе Шредингера о его работах по волновой механике, прочитанном для местных физиков. Впервые познакомившись с толкованием, которое Шредингер хотел дать своему математическому дуализму — волновой механике, я пришел в совершенное отчаяние при мысли о той путанице в понятиях, которая, по-моему, была бы внесена в атомную теорию в результате такого толкования. К сожалению, из моей попытки навести порядок в понятиях во время дискуссии ничего не получилось: я привел доводы в пользу предположения, что вследствие толкования Шредингера совершенно невозможно объяснить закон излучения Планка, но они никого не убедили, а Вильгельм Вин, профессор экспериментальной физики при Мюнхенском университете, мне довольно резко ответил, что теперь действительно будет покончено с квантовым скачком и всей атомной физикой и что упомянутые мной трудности, несомненно, будут преодолены Шредингером в ближайшем будущем. Написал ли я об этом эпизоде Бору, сейчас не помню; вскоре он пригласил Шредингера приехать в Копенгаген и просил его не только прочесть доклад по волновой механике, но и как можно дольше задержаться в Копенгагене, чтобы иметь достаточно времени для обсуждения интерпретации квантовой теории.

Дискуссия, насколько я помню, состоялась в Копенгагене в сентябре 1926 г. и произвела на меня особенно сильное впечатление благодаря тому, что в ней наиболее ярко проявилась личность самого Бора. Бор, бесспорно, был внимателен к людям и всегда шел им навстречу, но в дискуссии о самых важных для него проблемах познания он с фанатизмом и почти пугающей непреклонностью требовал от своих оппонентов ясного изложения всех доводов. Он вел продолжавшийся несколько часов спор и не уступил до тех пор, пока Шредингер не признал, что его толкование вовсе не объясняет закон Планка. Все попытки Шредингера уйти от этого горького признания были пункт за пунктом разбиты в бесконечных изнурительных дискуссиях.

⁹¹ Archive for the History of Quantum Physics. Interview with Frau Schrödinger on 5 Apr. 1963.

Должно быть из-за перенапряжения Шредингер заболел и по приглашению Бора остался на несколько дней в его доме. Сам Бор почти не отходил от постели Шредингера, непрерывно повторяя: «Но, Шредингер, Вы все-таки должны согласиться...» Однажды, почти в отчаянии, Шредингер воскликнул: «Если мы собираемся сохранить эти проклятые квантовые скачки, то я вообще сожалею, что имел дело с атомной теорией!» — «Зато остальные весьма признательны Вам за это, ведь благодаря Вам был сделан решающий шаг вперед в развитии атомной теории», — ответил Бор. Шредингер уехал из Копенгагена в подавленном настроении...»⁹²

Уже в том же 1926 г. работы Шредингера получили общее признание. Сборник их вышел в свет первым изданием на языке подлинника в 1926 г.⁹³, а вторым изданием в 1928⁹⁴ г., в английском переводе в 1928 г.⁹⁵, в переводе на французский язык в 1933 г.⁹⁶

Цикл работ Шредингера по волновой механике был высоко оценен современниками в СССР и уже в 1928 г. он был избран членом-корреспондентом Академии наук СССР. Представление было подписано А. Ф. Иоффе, П. П. Лазаревым и А. Н. Крыловым. Восемь лет спустя на мой вопрос о том, почему он, далекий от атомной проблематики, подписал это представление, А. Н. Крылов ответил: «Уж очень здорово сделано всё у Шредингера».

Приводим полный текст этого представления.

Записка об ученых трудах проф. Э. Шредингера⁹⁷

Эрвин Шредингер — профессор теоретической физики Берлинского университета, создатель новой квантовой механики. Основываясь на идеях де Бройля и Эйнштейна, Шредингер создал в систематическом ряде работ, напечатанных одна вслед за другой, стройную законченную теорию, разрешившую противоречие между квантовой и волновой природой света, тяготевшее над физикой в течение 20 лет. Он показал, что и другие попытки Борна и Гейзенберга заключены также в его теории. Столь же глубокий и строгий характер имеют и другие более ранние труды проф. Шредингера, посвященные статистической физике, электронной теории и строению атома.

Можно с уверенностью сказать, что работы Шредингера стоят в центре всей современной теоретической физики и повели уже к открытию волновых электронов.

Поэтому мы предлагаем избрать проф. Шредингера членом-корреспондентом Академии наук СССР по физическому разряду.

А. Иоффе, П. Лазарев, А. Крылов

В предисловии к сборнику своих статей, посвященных волновой механике, Шредингер, отмечая несомненный факт эволюции своих идей, так

⁹² В. Гейзенберг. Квантовая теория и ее интерпретация. — В кн.: Нильс Бор. Жизнь и творчество. М., «Наука», 1967, с. 15—16. Статья впервые опубликована в кн.: Niels Bohr. Hans liv og Virke. København, 1964.

⁹³ E. Schrödinger. Abhandlungen zur Wellenmechanik. Leipzig, 1926.

⁹⁴ E. Schrödinger. Abhandlungen zur Wellenmechanik. 2 Aufl. Leipzig, 1928.

⁹⁵ E. Schrödinger. Collected Papers on Wave Mechanics. London, 1928.

⁹⁶ E. Schrödinger. Mémoires sur la Mécanique Ondulatoire. Paris, 1933. Мы не приводим здесь более поздних переизданий, см. библиографию на с. 413 наст. изд.

⁹⁷ Изв. АН СССР. Отд-ние физ.-мат. наук, 1928, № 8, 621.

характеризует собственные работы: «Намекая на эти шесть статей, настоящее издание которых было вызвано исключительно лишь большим спросом, одна молодая особа сказала автору: «Не правда ли, ведь вы даже не думали, когда начинали, что из этого выйдет такая умная штука». Это мнение, с которым я при надлежащем ограничении лестного эпитета вполне согласен, пусть напоминает о том, что объединенные здесь в одном томе работы возникли последовательно одна за другой»⁹⁸.

Действительно, эволюция физических идей Шредингера в этих работах очень значительна. Как он сам там же отмечает, в них «имеется постепенное развитие представлений».

Корпускулярно, волновой дуализм как бы указывал, что направление дальнейшего исследования может быть найдено в «возможности усмотреть в принципе Гамильтона такой же результат игры волн, который, собственно, и лежит в основе движения материальных точек, точно так же, как мы уже давно привыкли видеть волны в явлениях света с их принципом Ферма»⁹⁹.

В первом сообщении, опубликованном в «Annalen der Physik» (1926, 79, № 4, 361) под названием «Quantisierung als Eigenwertproblem»¹⁰⁰, Шредингер вводит уравнение, ставшее в науке известным как уравнение Шредингера. Исходит он при этом из обычной формы уравнения в частных производных Гамильтона — Якоби:

$$H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = E. \quad (62)$$

Введя связанную с S новую неизвестную функцию ϕ , причем ϕ представляет собой произведение переменных, зависящих только от x, y, z , т. е. он полагает

$$S = k \ln \phi, \quad (63)$$

где постоянная k должна иметь размерность действия. Тогда получается

$$H\left(q, \frac{k}{\phi} \frac{\partial \phi}{\partial q}\right) = E. \quad (64)$$

Это уравнение может быть преобразовано так, что квадратичная форма от ϕ и ее первых производных будет равна нулю. Это можно сделать в случае исследования задачи одного электрона, даже если принять во внимание изменение массы. Отыскиваются такие действительные во всем пространстве конфигураций однозначные, конечные и дважды непрерывно дифференцируемые функции ϕ , которые дают экстремум интегралу от некоторой квадратичной формы, распространенному на все пространство конфигураций. Это всегда возможно, так как уравнение Шредингера есть уравнение типа Штурма—Лиувилля. «Эта вариационная проблема и заменяет у нас кван-

⁹⁸ E. Schrödinger. Abhandlungen zur Wellenmechanik, Barth, Leipzig, 1926. Vorwort zur ersten Auflage.

⁹⁹ Наст. изд., с. 232.

¹⁰⁰ Наст. изд., с. 8.

товые условия»¹⁰¹. Для постоянной k берется значение $h/2\pi$, чтобы получить совпадение с опытом. Тогда, выбрав декартовы прямоугольные координаты и обозначив через e заряд, а через m массу электрона, он получает, во-первых,

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0 \quad (65)$$

и, во-вторых,

$$\int df \delta\psi \frac{\partial\psi}{\partial n} = 0. \quad (66)$$

Таким образом, уже на второй странице своего первого сообщения Шредингер написал уравнение для стационарной задачи электрона, известное сейчас как уравнение Шредингера.

В конце этой работы Шредингер придал вариационному принципу более удовлетворительную форму:

$$\delta \int H d\tau = 0, \\ H = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial\psi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial z} \right)^2 \right] + V\psi^2 \quad (67)$$

с условием нормировки

$$\int \psi^2 d\tau = 1. \quad (68)$$

Введя множитель Лагранжа — W , можем записать эти два выражения в виде одной формулы так:

$$\delta \int (H - W\psi^2) d\tau = 0. \quad (69)$$

Величина $\int H d\tau$, варьируемая в выражении (69), совпадает с волновомеханическим средним значением H оператора Гамильтона H . Таким образом, смысл выражения (69) состоит в том, что полная энергия, вычисленная с помощью функции ψ , принимает наименьшее значение, совместимое с условием нормировки.

Уже в своем первом сообщении Шредингер ставит вопрос о физическом смысле функции ψ . Он отмечает, что толчком к попыткам выяснить этот смысл послужила для него работа де Бройля (см. выше).

Шредингер непосредственно примыкает к де Бройлю. Он говорит, что «довольно естественно связывать функцию ψ с некоторым колебательным процессом в атоме, в котором реальность электронных траекторий в последнее время неоднократно подвергалась сомнению»¹⁰².

¹⁰¹ Наст. изд., с. 9.

¹⁰² Наст. изд., с. 17.

Работа Шредингера появилась уже после работы Гейзенберга, в которой был резко поставлен вопрос о неприменимости классических понятий к внутриатомному электрону. Шредингер считает все же возможным интерпретировать атомные явления при помощи классических понятий. Конечно, от некоторых из них придется отказаться, другие же несколько видоизменить, но при этом можно не вносить в классическую теорию принципиально новых моментов. Эта точка зрения последовательно проводится Шредингером в его первых работах. Но он имеет за плечами всю историю атома Бора. Это заставляет его быть чрезвычайно осторожным. Поэтому Шредингер воздержался от такого построения изложения, в котором приведенное выше положение было бы исходным пунктом. Он предпочел «нейтральную математическую форму», которая, по его мнению, яснее показывает основные черты теории, хотя способ изложения, основанный на применении функции ψ к колебаниям, более нагляден. Шредингер не хочет развивать подробно это построение, прежде чем не проведет вычисления более сложных случаев. В параграфе третьем своей первой работы он дает только краткую характеристику этой возможной трактовки. Если сравнить его трактовку с изложением де Бройля, который исходил из распределения в пространстве фазовых волн и которому удалось показать, что на каждый период или квазипериод электрона всегда приходится целое число волн, то легко установить основное различие между их взглядами; оно состоит в том, что де Бройль рассматривает волны в поступательном движении, в то время как Шредингер берет за основу понятие колебания и приходит к стоячим собственным колебаниям. Как ни важно это различие в смысле конкретной физической интерпретации, все же здесь налицо единая тенденция, общая для всего волнового аспекта новой теории атома.

Для дальнейшего развития этой точки зрения Шредингер предполагает, что энергия E связана с частотой ν соотношением

$$\nu = C' \sqrt{C + E} = C' \sqrt{C} + \frac{C'}{2\sqrt{C}} E + \dots, \quad (70)$$

где C — очень большая постоянная.

Чем диктуется такой выбор соотношения частоты и энергии? Дело в том, что из теории колебаний хорошо известно, что $E \sim \nu^2$ (при заданной амплитуде)¹⁰³; эта теория имеет очень общий характер и применима ко всякому колебательному процессу независимо от его специфики. Однако если взять для атома $E \sim \nu^2$, то не будет не только совпадения с опытом, но также и связи между теорией, развиваемой Шредингером, и старой квантовой теорией, согласно которой $E \sim \nu$. Поэтому «чутье подскажет каждому теоретику квантов», что E должно быть пропорционально частоте ν . Введенное соотношение и дает возможность удовлетворить этому требованию и, кроме того, позволяет сделать еще один шаг вперед. Мы получаем возможность объяснить или,

¹⁰³ Строгий вывод боровского соотношения между частотой и энергией дан Шредингером во втором сообщении (наст. изд., с. 24—27).

во всяком случае, улучшить понимание постулата частот Бора. Так как по второму постулату Бора частоты излучения пропорциональны разностям энергий E , то согласно (70) они пропорциональны также разностям собственных частот этих гипотетических колебательных процессов. Эти собственные частоты, конечно, очень велики в сравнении с частотами испускания. Если же их сравнить между собой, то они почти совпадают, в силу чего частоты испускания кажутся нам глубокими «разностными тонами» собственных колебаний, происходящих со значительно большей частотой. Излучаемая атомом световая волна и обладает этой частотой, обусловленной как бы некоторым перемещением энергии из одного нормального колебания в другое. «Нужно лишь предположить, что световая волна причинно связана с биениями, необходимо появляющимися при подобных переходах в любой точке пространства» ¹⁰⁴. Это, собственно, и есть основная исходная идея волновой механики в ее первоначальном варианте.

В начале своей работы Шредингер в основном идет еще по пути, наметченному де Бройлем. Наглядная картина, возможно меньше удаляющаяся от классической физики, — вот к чему стремится Шредингер. «Не требует особых разъяснений то обстоятельство, что представление, по которому при квантовом переходе энергия преобразуется из одной колебательной формы в другую, значительно более удовлетворительно, чем представление о перескакивающем электроны» ¹⁰⁵.

Теория Бора была наглядна в том, что касалось стационарных состояний. Что может быть нагляднее картины быстро вращающихся вокруг ядра — солнца маленьких шариков-электронов — планет? Зато основной для физики атома процесс излучения и поглощения был лишен такой наглядности. Что означает скачок электрона с одной дозволенной орбиты на другую, что с ним происходит в то время, когда он отплыл от одного берега, но еще не пристал к другому, как представить течение этого процесса во времени — все эти вопросы не находили в теории Бора никакого ответа. Электронным скачкам ¹⁰⁶ было трудно подыскать какую-либо аналогию в классической физике. Зато если заменить эти скачки картиной перехода энергии из одной формы колебаний в другую, то сразу можно воспользоваться всем разработанным мощным аппаратом учения о колебаниях и волнах. Немедленно же можно привлечь на помощь аналогии со струной, мембраной, использовать представления о резонансе, биениях и т. п. Квантовый переход, сохранив свой специфический характер, приобретает наглядность и тесно связывается с классической картиной излучения.

¹⁰⁴ Наст. изд., с. 18.

¹⁰⁵ Там же, с. 19.

¹⁰⁶ Позднее Шредингер объяснил мотивы создания им волновой механики желанием «разделаться с точечным электроном» (*E. Schrödinger. Elektrische Nachrichten Technik*, 1928, 5, 485—488). Уместно в связи с этим вспомнить высказывание М. Борна: «Движущей силой его рассуждений была антипатия к теории стационарных состояний и квантовых скачков Бора, которую он хотел заменить чем-нибудь более приемлемым. Я полностью понимаю его триумф, когда ему удалось интерпретировать эти ужасные стационарные состояния как безобидные собственные колебания, а таинственные квантовые числа как аналогию порядковым числам музыкальных обертонов» (*М. Борн. Физика в жизни моего поколения. М., ИЛ, 1963, с. 255*).

Но возможность сделать более наглядной картину процесса испускания и поглощения света атомом приводит также к замене имевшей место у Бора прерывности механизма излучения непрерывной картиной. Изменение формы колебаний может происходить непрерывно во времени и пространстве, оно может длиться так долго, как длится процесс испускания¹⁰⁷. Здесь, таким образом, как бы намечается возможность вернуться к непрерывной картине макроскопической физики, уничтожив грань, установленную теорией Бора между нею и физикой микрокосма.

Это представление о процессе излучения развивалось уже ранее Зоммерфельдом¹⁰⁸.

Шредингер указывает, что в старой квантовой теории создалось своеобразное положение: принцип Гамильтона — надежнейший и лучший проводник, без которого просто нельзя было бы обойтись, и рядом с ним совершенно новые непонятные требования, так называемые квантовые условия и квантовые постулаты. «Они звучали, как грубые диссонансы в симфонии классической механики, и все же странным образом казались созвучными ей... Мы стояли перед трудной задачей спасти сущность механики, *чье дыхание ясно чувствовалось в микрокосмосе* (курсив Шредингера), и в то же время, так сказать, выпросить у нее (у механики. — Л. П.) признание квантовых условий в качестве вытекающих из ее оснований положений, а не грубых внешних требований»¹⁰⁹. Действительно, Уилсон, Зоммерфельд и Эпштейн, исходя из основополагающих работ Бора, придавали квантовому постулату стационарных орбит такую форму, в которой связь с механикой Гамильтона—Якоби совершенно ясна. И именно эта формулировка оказалась способной охватить не только случай кругового движения, как это было у Бора, но и случай эллиптического и других сложных движений.

Основываясь на той прямой, хотя и внешней связи между классической механикой и квантовым постулатом, которую дает эта теория, удалось осветить целый ряд опытных фактов. Такой успех привел к попытке рассматривать теорию квантов как логическое обобщение классической физики. Бор отмечает, что стремление рассматривать теорию квантов как рациональное обобщение классических теорий привело к установлению так называемого принципа соответствия. Роль этого принципа в развитии классической квантовой теории была громадна.

В старой квантовой теории принцип соответствия не был обоснован чем-либо иным, кроме общей идеи связи макро- и микрокосмоса и правильности результатов его применения. Недаром Зоммерфельд назвал принцип соответствия «волшебной палочкой», при помощи которой может быть открыт ряд атомных явлений и их законов.

Шредингер хочет перекинуть мост между классической макроскопической физикой и физикой микрокосмоса. Во второй статье он пишет: «Сила же

¹⁰⁷ Наст. изд., с. 19.

¹⁰⁸ A. Sommerfeld. Das Planck'sche Wirkungsquantum und seine allgemeine Bedeutung für die Molekularphysik. — Phys. Z., 1911, 24, 1062.

¹⁰⁹ Наст. изд., с. 232.

предложенного в данной работе метода заключается, насколько я могу судить, в использовании руководящего физического представления, согласно которому микроскопические и макроскопические явления связаны друг с другом... Мне лично особенно нравится приведенное в конце предыдущей статьи истолкование излучаемых частот как «биений», причем я думаю, что таким образом будет получено также наглядное истолкование формул для интенсивности»¹¹⁰. Наглядность и органическое сочетание квантовых условий с уравнениями движения, которые оказываются здесь, конечно, не обычными уравнениями классической механики, представляют собой основное преимущество волновой механики. Эта теория кажется Шредингеру глубоко отличающейся от квантовой механики, разрабатываемой с 1925 г. Гейзенбергом, Борном и Иорданом. Но он питает надежду, что эти две теории не только не будут бороться друг с другом, но, наоборот, благодаря чрезвычайному различию исходных точек и метода, дополнят одна другую. Гейзенберг считает, что уравнение (65) и связанный с ним комплекс математических методов представляет собой «наиболее мощные математические методы для разработки квантово-теоретических проблем. Для физического толкования, однако, эти методы пока что не дают нам ничего нового»¹¹¹.

Шредингер пытался раскрыть физический смысл атомных процессов. Исходя из той физической предпосылки, что волновая группа (волновой пакет) представляет собой частицу по классической теории, Шредингер исследует закон распространения этих волн. Шредингер стремится определить характер некоторых колебаний в атоме по аналогии с макроскопическими колебательными процессами. Недаром в том же 1926 г. Шредингер печатает статью под характерным названием «Der stetige Übergang von der Mikrozur Makromechanik»¹¹², названием, хорошо показывающим ведущую тенденцию в работе Шредингера. Как же развить эту идею непрерывного перехода от макро- к микрофизике, и обратно? Для этого проще всего пойти по пути развития и расширения оптико-механической аналогии, известной уже со времени Гамильтона.

Второе сообщение, которое логически должно было бы предшествовать первому, Шредингер начинает с «гамильтоновой аналогии между механикой и оптикой». Он указывает: «Вариационный принцип Гамильтона может рассматриваться как принцип Ферма для распространения волн в конфигурационном пространстве (q -пространстве)...»¹¹³ Таким образом, все геометрические утверждения рассматриваются в неевклидовом смысле в q -пространстве. Это сразу придает символический, не наглядный характер всему построению Шредингера. Бор правильно отмечает, что «символический характер метода Шредингера ясен не только потому, что простота его, так же как и метода матриц, основана на существенном применении мнимых арифметических величин. Здесь не может быть речи о непосредственной связи с нашим при-

¹¹⁰ Наст. изд., с. 39.

¹¹¹ В. Гейзенберг. Физические принципы квантовой теории. ГТТИ, 1932, с. 88.

¹¹² Наст. изд., с. 51.

¹¹³ Наст. изд., с. 21.

вычным воззрением прежде всего потому, что «геометрическая» проблема, представляемая волновым уравнением, отнесена к так называемому конфигурационному пространству, число измерений коего равно числу степеней свободы системы...»¹¹⁴.

Зачем вводится Шредингером пространство конфигураций с неевклидовым мероопределением? Дело в том, что приравнивание $\text{grad} S$ некоторой функции координат, позволяющее вывести представление о «волнах» в пространстве, возможно в общем случае только с помощью $3n$ -мерной неевклидовой геометрии. В трехмерном же евклидовом пространстве оно возможно только тогда, когда система (частица) обладает кинетической энергией, равной сумме квадратов импульсов, умноженных на постоянную. Однако легко представить себе системы, не удовлетворяющие этому условию.

Оптически неоднородная среда искривляет траектории световых лучей, т. е. ее преломляющая способность может быть истолкована как неевклидовость ее метрики. Аналогично механика в конфигурационном пространстве для всех случаев движения механической системы, кроме инерциального движения, имеет неевклидов характер (так как имеет место искривление траекторий). Как мы видим, задание потенциальной энергии эквивалентно заданию показателя преломления некоторой оптической среды, т. е. заданию неевклидова мероопределения конфигурационного пространства. Тогда уравнение Гамильтона—Якоби имеет смысл уравнения, вводящего метрику, т. е. определяющего искривления фазовых гиперповерхностей или нормальных к ним траекторий изображающей системы в конфигурационном пространстве. Конечно, наглядность благодаря этому становится очень условной, но, во-первых, в частном случае одной частицы в силовом поле получится обычный трехмерный случай и обычные трехмерные волны; во-вторых, в q -пространстве сохраняют свое значение все привычные физические величины и математические операции.

Исходя из макроскопического волнового уравнения, можно получить уравнение Шредингера, воспользовавшись уравнением Гамильтона—Якоби и введя гипотезу о характере связи количества движения «электрона-частицы» и длины волны «электрона-волны». Таким образом, совершается переход от макромеханики через оптику лучей и волновую оптику к микромеханике¹¹⁵.

Сравним этот путь с гамильтоновым переходом от волновой оптики через оптику лучей к макромеханике. В этом сравнении раскрывается принципиальное различие оптико-механической аналогии Гамильтона и Шредингера — различие, обусловленное физическим содержанием. В самом деле, для перехода к микромеханике оказывается необходимым ввести соотношение $\lambda = h/p$, которое характеризует соотношение волновой и корпускулярной картины, т. е. говорит о каких-то структурных особенностях исследуемой области. Аналогия Гамильтона целиком лежит в пределах макроскопической

¹¹⁴ Н. Бор. Квантовый постулат и новое развитие атомистики. — Усп. физ. наук, 1928, 8, вып. 3, с. 326.

¹¹⁵ Классическую механику можно было бы назвать «геометрической оптикой волновой механики» (Г. Голдстейн. Классическая механика. М., Гостехиздат, 1957, с. 337)

физики, в то время как Шредингер осуществляет переход от макро- к микрофизике. Если говорить языком современной физики, то аналогия механики и геометрической оптики может быть обоснована тем, что при приближениях геометрической оптики движение группы волн выражается уравнениями, сходство которых с уравнениями теории Якоби чрезвычайно велико. Что же касается аналогии волновой механики и оптики, то здесь положение значительно более сложное. Дело в том, что хотя в приведенных выше соображениях речь шла о волнах, о фазовой скорости и тому подобных понятиях волновой оптики, все же аналогия должна быть усматриваема не между механикой и волновой оптикой, а между механикой и оптикой геометрической. «Быть может, наша классическая механика представляет полную аналогию с геометрической оптикой... Тогда целесообразно попытаться построить «волновую механику», и первым шагом на этом пути является волновое истолкование представлений Гамильтона»¹¹⁶.

Двигаясь по этому пути, «мы вместе со Шредингером перейдем от макромеханики через оптику лучей и волновую оптику к микромеханике. В той же мере как волновая оптика является уточнением оптики лучей для областей порядка длины волны, точно так же мы надеемся построить микромеханику, уточняющую макромеханику и делающую ее пригодной для областей атомных размеров»¹¹⁷. Для этого будем исходить из самого простого допущения, что те системы волн, которые были рассмотрены выше, являются синусоидальными волнами. «Хотя это предположение является простейшим и естественным, однако вследствие его основного значения нужно подчеркнуть некоторую вносимую им произвольность»¹¹⁸.

Произвол здесь, конечно, очень ограничен и по существу сводится к тому, что в начале исследования рассматривается простейшее отношение¹¹⁹. Это простейшее отношение, с одной стороны, дает возможность отчетливо вскрыть основную руководящую идею, а с другой — возможность впоследствии построить более широкое обобщение.

Классическая механика приводила к непрерывному ряду решений, в то время как в природе осуществлено только ограниченное число этих решений. Математически дело состояло в том, что «...в то время как принцип Гамильтона требует только, чтобы некоторый интеграл был минимумом, но не определяет значений этого минимума, квантовые же условия ограничивают значения минимума целыми, кратными универсальной мировой постоянной, именно планковской постоянной действия»¹²⁰. Добавочные утверждения, необходимые для решения уравнения Шредингера в виде дискретного ряда значений ϕ , имеют другой характер, чем квантовые условия Бора. Эти положения являются утверждениями того типа, который часто встречается в физике при решении уравнений в частных производных, а именно начальными и граничными условиями.

¹¹⁶ Наст. изд., с. 27.

¹¹⁷ А. Зоммерфельд. Волновая механика М., ОНТИ, 1933, с. 9.

¹¹⁸ Наст. изд., с. 27.

¹¹⁹ Строго говоря, оно лишь представляется нам или может быть «простейшим».

¹²⁰ Наст. изд., с. 232.

«...квантовые условия во всех случаях классической динамики, — говорит Шредингер, — которые я до сих пор исследовал, заключаются в самом уравнении...»¹²¹ (уравнение (65). — Л. П.). Оно дает стационарные уровни без всяких дополнительных предположений, кроме почти само собой разумеющегося для физической величины требования к функции ψ : она должна быть однозначной, конечной и непрерывной во всей области пространства конфигураций. Итак, мы приходим к важнейшему выводу о характере выражения атомных процессов в q -пространстве.

Частицы ассоциируются с максимумами групп волн, «волновых пакетов». Такой волновой пакет строится наложением синусоидальных волн, у которых частоты и длины волн, а также и направления распределения, хотя и различны, но изменяются непрерывно в некотором узком интервале. Так как электрон интерпретируется как протяженная частица, то волновой пакет должен обладать конечными размерами. Но это невозможно, так как волновые пакеты, вообще говоря, не сохраняют постоянных размеров, за исключением частного случая излучения гармонического осциллятора. Они расползаются в пространстве.

Уже в следующем году Гейзенберг показал, что гармонический осциллятор представляет собой единственное исключение¹²². По мнению Бора, мы имеем здесь дело «с противоречием волнового принципа суперпозиции и предположения об индивидуальности частиц»¹²³. Кроме того, представление о корpusкулах как о волновых пакетах противоречит фактам об интерференции и дифракции соответствующих лучей. «Если мы вообразим себе пучок катодных лучей как собрание большого числа волновых пакетов, каждый из которых соответствует отдельному электрону, то рассеяние этих лучей дифракционной решеткой не произведет обычной интерференционной картины...»¹²⁴

«...действительное механическое явление следует понимать или изображать как волновой процесс в q -пространстве, а не как движение изображающей точки в этом пространстве»¹²⁵. Таким образом совершается переход к волновой механике. «Переходя от старого к новому представлению, мы выигрываем в возможности учитывать явление дифракции, или, лучше сказать, нечто весьма аналогичное явлению дифракции света...»¹²⁶.

Шредингер ясно сознает «печальную» необходимость отказаться от неограниченного, некритического применения в микрокосме некоторых понятий классической физики. В первую очередь речь идет о понятии траектории. Шредингер указывает: «Напротив, можно запутаться в неразрешимых противоречиях, если пытаться, как это кажется естественным, полностью удерживать и для атомных процессов понятие траектории системы: подобно этому.

¹²¹ Там же, с. 37.

¹²² W. Heisenberg. Z. Phys., 1927, 43, 172.

¹²³ Н. Бор. Квантовый постулат и новое развитие атомистики. — Усп. физ. наук, 1928, 8, вып. 3, с. 326.

¹²⁴ Я. И. Френкель. Волновая механика. Ч. 1. М.—Л., ГТТИ, 1933, с. 46.

¹²⁵ Наст. изд., с. 33.

¹²⁶ Там же, с. 235.

бессмысленно, как известно, подробно изучать в области дифракционных явлений движение светового луча»¹²⁷. Это значит, что понятие траектории должно быть заменено представлением о системе волновых поверхностей, нормальных к этой траектории. «Но эти волновые поверхности, даже если мы будем рассматривать их небольшой участок, охватывают все же некоторый узкий пучок возможных траекторий и находятся со всеми ими в одинаковом соотношении. Согласно старому представлению одна из этих траекторий выделяется в каждом конкретном случае как «действительная» из всех остальных, «просто возможных». В новой теории дело обстоит иначе. Мы сталкиваемся здесь со всей глубиной логической противоположности между случаем «или-или» (механика точки) и случаем «и-и» (волновая механика)»¹²⁸ и с противоположностью формально-логического мышления и мышления диалектического, добавим мы от себя. Итак, нельзя говорить, что электрон в атоме находится в определенном месте квантовой траектории. Кроме того, законы квантовой механики не определяют отдельной орбиты.

Напомним кратко основные моменты возникновения матричной механики Гейзенберга—Борна—Иордана. Ее развитие началось с работы В. Гейзенберга. Статья Гейзенберга поступила в редакцию «*Zeitschrift für Physik*» 29.VII 1925 г. и вышла в свет в этом журнале (1925, 33, 879—893). В этой работе Гейзенберг рассматривал уравнение ангармонического осциллятора. Он представил обобщенные координаты q_i в виде коэффициентов q_{ik} ряда Фурье по всем частотам $\nu_{ik} = (E_i - E_k)/h$. Он нашел также выражения для квадратов и произведений координат. Разработанный им метод давал правильные значения частот и вероятностей переходов.

Вскоре М. Борн заметил, что математические соотношения, найденные Гейзенбергом¹²⁹, могут быть представлены с помощью аппарата исчисления матриц. Координаты q и импульсы p могут быть представлены матрицами, а не обыкновенными числами, а следовательно, для них имеет место некоммутативная алгебра. М. Борн и П. Иордан¹³⁰ вывели соотношение (1 — единичная матрица):

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi} 1, \quad (71)$$

которое заменяет правило квантования

$$\oint p, dq_i = nh \quad (72)$$

квантовой теории Н. Бора.

Они нашли явное выражение для p и q гармонического осциллятора и выяснили физический смысл диагональных и недиагональных элементов соответствующих матриц¹³¹.

¹²⁷ Наст. изд., с. 34.

¹²⁸ Там же, с. 237.

¹²⁹ В. Гейзенберг работал в это время ассистентом М. Борна.

¹³⁰ П. Иордан также работал в это время ассистентом М. Борна.

¹³¹ *M. Born, P. Jordan. Z. Phys., 1925, 34, 858—888, поступила в редакцию 27.IX 1925.*

В то же время П. Дирак развивал теорию, в которой рассматривал квантовомеханические переменные как новые по своей природе числа, но не придавая им конкретного вида матриц. Он нашел, что коммутатор $xu - ux$ любых двух переменных аналогичен скобкам Пуассона (умноженным на $ih/2\pi$) классической физики. Отсюда получается выражение (71)¹³². В более поздней работе¹³³ он указал, что нашел выражение (71) независимо от М. Борна и П. Иордана.

В конце 1925 г. М. Борн провел некоторое время в Массачусетском технологическом институте, где и развил совместно с Н. Винером¹³⁴ основные идеи применения операторов к переменным, которые были представлены матрицами Борном и Иорданом и q -числами — Дираком. Это позволило объединить в единой схеме волновую механику Шредингера и матричную механику Гейзенберга—Борна¹³⁵.

В конце февраля 1926 г., заканчивая второе сообщение, Шредингер еще не видел путей решения проблемы доказательства того, что волновая и матричная механика «окажутся взаимно дополняющими».

Однако не прошло и двух месяцев с начала публикации серии работ Шредингера в «Annalen der Physik», как он напечатал там же знаменитую статью¹³⁶ «Об отношении квантовой механики Гейзенберга—Борна—Иордана к моей», в которой показал полную математическую эквивалентность матричной и волновой механики.

Еще до опубликования этой статьи К. Ланцош напечатал в январе 1926 г. важную работу¹³⁷, на которую ссылается и Шредингер.

Как подчеркивает Шредингер, Ланцош, используя аппарат теории интегральных уравнений, сумел показать, что «гейзенберговская атомная динамика может быть истолкована также и в непрерывном духе»¹³⁸. Шредингер детально изучал статью Ланцоша и едва ли можно сомневаться в ее плодотворном влиянии на него. Впрочем, непосредственный математический переход от формулировки Ланцоша к волновой механике Шредингера далеко не очевиден, и аналогия между этими двумя формами не является достаточно простой и ясной, что и подчеркивает Шредингер. Идея Ланцоша о возмож-

¹³² P. A. M. Dirac. Proc. Roy. Soc., 1925, 109A, 642—653.

¹³³ P. A. M. Dirac. Proc. Roy. Soc., 1926, 110A, 561—579.

¹³⁴ M. Born, N. Wiener. Z. Phys., 1926, 36, 174—187; J. Math. and Phys., 1926, 5, 84—98.

¹³⁵ Однако в отношении физической интерпретации квантовой механики ситуация была существенно иной. Гейзенберг критиковал Шредингера за его подход к проблемам теории атома. В письме Паули в начале 1926 г. он пишет: «Чем больше я размышляю о физической стороне теории Шредингера, тем более отталкивающей (desto abscheulicher) она мне кажется» (цит. по: M. Jammer, S. 272). Шредингер не менее резко отзывался о теории Гейзенберга: «...я знал о его теории, однако меня отпугивали, если не сказать отталкивали, казавшиеся мне очень трудными методы трансцендентной алгебры и отсутствие наглядности» (наст. изд., с. 57).

¹³⁶ Наст. изд., с. 56.

¹³⁷ C. Lanczos. Ueber eine feldmässige Darstellung der neuen Quantenmechanik. — Z. Phys., 1926, 35, 812.

¹³⁸ M. Jammer. Op. cit., p. 276.

ности более тесного объединения квантовой механики с электродинамикой нашла дальнейшее развитие в одной из работ Шредингера¹³⁹.

Эта работа Ланцоша повлияла также на Эккарта, который 31 марта 1926 г. (статья Шредингера еще не была опубликована) представил в Национальную академию наук США статью, в которой на примере линейного осциллятора доказывалась эквивалентность волновой и матричной механики¹⁴⁰. Эккарт обобщил этот результат на произвольные системы в статье, завершенной им 7 июня 1926 г. и опубликованной тогда же в «Physical Review»¹⁴¹.

В ней показана эквивалентность волновой и матричной механики, исходя из матричной механики и работы М. Борна и Н. Винера об операторах в квантовой механике¹⁴². Эти два независимых различных подхода, решавших столь принципиальную задачу, характерны для стремительного развития основ квантовой механики в 1925—1926 гг.

В первой половине марта 1926 г. Шредингер нашел путь к установлению формально математической эквивалентности матричной и волновой механики, исходя из сходства матричного перестановочного соотношения

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi} 1 \quad (73)$$

и операторного равенства

$$\left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}\right) q - q \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}\right) = \frac{h}{2\pi i}. \quad (74)$$

Развитое на этой основе доказательство эквивалентности подхода Гейзенберга, Борна, Иордана, с одной стороны, и де Бройля, Шредингера — с другой, без преувеличения может быть названо научным шедевром. Это был поразивший Шредингера результат, ставший для него триумфом: установление математического тождества матричной и волновой механики.

Насколько эта проблема и ее решение, так сказать, носились в «идейном воздухе» тех месяцев (в буквальном смысле слова), видно и из следующего воспоминания М. Борна: «Мы выразили энергию как d/dt и написали перестановочный закон для энергии и времени в виде тождества $[t(d/dt) - (d/dt)t]$, применив его к некоторой функции от t ; абсолютно то же самое, что имеет место для q и p . Однако мы не увидели этого. Я никогда не прощу этого себе, потому, что если бы мы сделали это, то сразу получили бы всю волновую механику из квантовой механики на несколько месяцев раньше Шредингера»¹⁴³.

Третье сообщение содержит подробное изложение шредингеровской теории не зависящих от времени возмущений. Шредингер расширяет известный

¹³⁹ Наст. изд., с. 145.

¹⁴⁰ C. Eckart. Proc. Nat. Acad. Sci. U. S. A., 1926, 12, 473.

¹⁴¹ C. Eckart. Phys. Rev., 1926, 28, 711—726.

¹⁴² M. Born, N. Wiener. Z. Phys., 1926, 36, 174—187.

¹⁴³ Archive. Interview with M. Born 17.X 1962. Цит. по: Jammer, S. 223.

метод Рэлея, примененный им для изучения акустических колебаний. Шредингер обобщил метод Рэлея в двух направлениях: коэффициенты в дифференциальных уравнениях у него не являются обязательно постоянными, как это было у Рэлея, и им рассмотрены случаи вырождения. Шредингер здесь же применил эту теорию возмущений к штарк-эффекту водородного атома (частоты и интенсивности линий)¹⁴⁴ и получил результаты, хорошо согласующиеся с экспериментом. Все это можно найти в любом курсе квантовой механики.

«Среди многих прекрасных результатов квантовой механики теория возмущений, развитая Шредингером, занимает выдающееся место. Она более проста, чем астрономическая теория возмущений классической механики и в своих приложениях не ограничивается проблемой двух тел»¹⁴⁵.

В четвертом сообщении Шредингер развивает теорию зависящих от времени возмущений и вводит дифференциальное уравнение для изменения ψ со временем. Волновое уравнение имеет место для волн с частотой E/h , т. е. для волн, которые включают время с помощью множителя $e^{2\pi i Et/h}$ или $e^{-2\pi i Et/h}$. Следовательно,

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \pm \frac{2\pi i E}{h} \psi, \quad (75)$$

и мы приходим к уравнению

$$H\left(q_k, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q_k}\right) \psi = \pm \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (76)$$

или

$$-\frac{h^2}{8\pi^2} \Delta \psi + V\psi = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (77)$$

Это уравнение является исходным пунктом для изучения дисперсии, т. е. поглощения и переизлучения света произвольной частоты ν . Шредингер отдельно рассмотрел случай резонанса, когда ν равно разности частот $(E_i - E_k)/h$. Возможность излучения частот, равных $\nu \pm (E_i - E_k)/h$, уже предсказанная Смекалем¹⁴⁶ и рассчитанная Крамерсом и Гейзенбергом¹⁴⁷ в рамках старой квантовой теории, здесь разработана детально.

Отметив, что уравнение (76) имеет структуру уравнения диффузии¹⁴⁸ с мнимым коэффициентом диффузии, Шредингер допускает комплексность

¹⁴⁴ В это же время аналогичные результаты были получены Эпштейном (*P. S. Epstein. Phys. Rev.*, 1926, 28, 695), метод которого имел более специальный характер, чем общая теория возмущений, разработанная Шредингером. Одновременно появилось еще несколько работ (*W. Pauli. Z. Phys.*, 1926, 38, 336; *G. Wentzel. Z. Phys.*, 1926, 38, 518; *J. Waller. Z. Phys.*, 1926, 38, 695). Однако ни в одной из них не был рассмотрен вопрос об интенсивностях спектральных линий.

¹⁴⁵ А. Зоммерфельд. *Строение атома и спектры*. Т. 2. М., ГТТИ, 1956, с. 293.

¹⁴⁶ А. Smecal. *Naturwissenschaften*, 1923, 11, 873.

¹⁴⁷ Н. А. Kramers, W. Heisenberg. *Z. Phys.*, 1925, 31, 681.

¹⁴⁸ Волновое уравнение Шредингера существенно отличается от классического волнового уравнения Даламбера, так как оно линейно относительно времени, и ψ известно, та-

функции ψ (которая в начале его работ предполагалась действительной), называемой им «механическим полевым скаляром ψ »¹⁴⁹.

Заключительная глава этого сообщения посвящена обсуждению физического смысла функции ψ . Шредингер интерпретирует теперь $\psi\psi^*$ как весовую функцию в конфигурационном пространстве, которая выражает распределение плотности электрического заряда в q -пространстве.

Шредингер показал: возникшая еще в 1913 г. загадка, что в стационарном состоянии движущийся вокруг ядра электрон не излучает, а излучение возникает при «квантовом скачке», о котором ничего определенного с точки зрения механики сказать нельзя, может быть решена «простой» интерпретацией волновой функции ψ . Противоречие с классической электродинамикой исчезает (по крайней мере, для одноэлектронной системы), если связать функцию ψ с плотностью электрического заряда с помощью уравнения

$$e\psi\psi^* = \rho, \quad (78)$$

где ψ^* — комплексно-сопряженное значение ψ , e — заряд электрона.

Уравнение (78) означает, что плотность электрического заряда определяется произведением e на квадрат абсолютной величины ψ . Так как уравнение Шредингера (65) однородно, то ψ определена только с точностью до произвольного постоянного множителя и ее значение надо установить с помощью нормирующего условия, которое в случае одноэлектронной системы будет просто

$$\int \psi\psi^* d\tau = 1. \quad (79)$$

Таким образом, в этой картине вместо точечного вращающегося электрона появляется заряд, распределенный во всей окрестности ядра, плотность которого вследствие определения (76) и $e^{2\pi i\nu t} \cdot e^{-2\pi i\nu t} = 1$ постоянна во времени. На этом основании и в согласии с классической электродинамикой для каждого стационарного состояния, определенного какой-либо собственной функцией, излучение не имеет места. Напротив того, если два колебания с различными собственными значениями энергии E_n и E_m налагаются друг на друга, зависящие от времени множители в $\psi\psi^*$ взаимно не уничтожаются. В результате остается еще периодическое во времени изменение с частотой

$$\nu = \nu_n - \nu_m = \frac{E_n - E_m}{h}, \quad (80)$$

которое в согласии как с теорией Максвелла, так и с условием частоты Бора вызывает излучение этой частоты.

ким образом, для любого момента времени t , если оно определено вначале. Если начальное движение определено, то знак $\pm$ в уравнении (76) указывает только на направление движения.

¹⁴⁹ Шредингер неохотно пошел на введение комплексных волновых функций. В письме Лоренцу 6 июня он писал: «Неприятно — против этого даже следует возражать — применение комплексных чисел. ψ — все-таки реальная функция» (см. с. 309 наст. изд.).

Эта картина, которая вытекала уже из результатов, рассмотренных в первом сообщении Шредингера, и подробно развитая им в § 7 четвертого сообщения¹⁵⁰, создавала надежду, что полное и последовательное описание атомных явлений можно провести методом, подобным методам макроскопической физики поля. Это означало возможность однозначного описания явлений в области атома, если задать силу поля и значения функции ψ как функции трех координат (x, y, z) и времени. Однако эта надежда, как известно, не оправдалась. Для того чтобы в рамках физики поля решить многоэлектронную (n электронов) задачу, нужно рассматривать ψ как функцию $3n$ независимых координат x_n, y_n, z_n и времени. Иначе говоря, стоячие колебания, представляющие определенное стационарное состояние атома, происходят не в реальном трехмерном пространстве, а в некоем абстрактном многомерном пространстве конфигураций (ср. статистическую физику Максвелла, Больцмана, Гиббса): «... ψ является функцией, заданной не в реальном, а в конфигурационном пространстве»¹⁵¹.

Таким образом, становится неизбежным отказ от наглядного полевого представления атомных процессов, столь желанного для Шредингера.

В связи с вопросом об интерпретации функции ψ . М. Борн говорит о Шредингере: «Он думал, однако, что осуществил возврат к классическому мышлению. Он рассматривал электрон не как частицу, но как некоторое распределение плотности, которое давалось квадратом его волновой функции $|\psi|^2$. Он считал, что следует полностью отказаться от идеи частиц и квантовых скачков, и никогда не сомневался в правильности этого убеждения. Я, напротив, имел возможность каждодневно убеждаться в плодотворности концепции частиц, наблюдая за блестящими опытами Франка по атомным и молекулярным столкновениям, и был убежден, что частицы не могут быть просто упразднены. Следовало найти путь к объединению частиц и волн. Я видел связующее звено в идее вероятности»¹⁵².

В другом месте М. Борн пишет: «Статистическая интерпретация волн де Бройля была подсказана мне моим знанием экспериментов по атомным столкновениям, которые я изучил благодаря моему коллеге экспериментатору Джеймсу Франку»¹⁵³.

Отыскивая квантовомеханическое описание столкновений свободных частиц (электронов, атомов и т. п.), Борн принял формализм волновой механики, заявив, что «среди различных форм теории только формализм Шредингера показал себя пригодным для этой цели; по этой причине я склонен рассматривать его как наиболее глубокую формулировку квантовых законов»¹⁵⁴.

¹⁵⁰ См. наст. изд., с. 134—138. Здесь Шредингер получает также релятивистское обобщение своего уравнения (уравнение Шредингера—Гордона), учитывающее взаимодействие электрона с электромагнитным полем.

¹⁵¹ Наст. изд., с. 73.

¹⁵² М. Борн. Воспоминания. — Усп. физ. наук, 1970, 102, вып. 1, 160—161.

¹⁵³ М. Борн. Experiment and Theory in Physics. Cambridge, 1943, p. 23.

¹⁵⁴ М. Борн. Zur Quantenmechanik der Stossvorgänge. Z. Phys., 1926, 37, 863—867, статья поступила в журнал 25.VI 1926.

Краткое предварительное изложение основных результатов М. Борна в разработке вероятностной интерпретации квантовой механики содержалось уже в статье ¹⁵⁵, поступившей в редакцию «*Zeitschrift für Physik*» 25 июня 1926 г. (примерно месяцем раньше, чем более подробная вторая статья). Вторая статья М. Борна по этому вопросу появилась в том же журнале ¹⁵⁶ и именно на нее ссылается Шредингер в своей работе «Закон сохранения энергии-импульса волн материи» (с. 145 наст. изд.), где он пишет ему: «эта интерпретация... не представляется окончательной и вполне удовлетворительной». Третья статья М. Борна, относящаяся к этому циклу исследований, была опубликована в том же 1926 г. в «*Göttingen Nachrichten*» ¹⁵⁷. Интересно отметить, что Шредингер в это время отклоняет статистическую интерпретацию, так как ему кажется, что «она... означает принципиальный отказ от понимания индивидуальных процессов» ¹⁵⁸.

Началась эра вероятностной трактовки законов квантовой механики. Для Шредингера она была и осталась до конца его дней чуждой и неприемлемой.

¹⁵⁵ *M. Born. Z. Phys.*, 1926, 37, 863.

¹⁵⁶ *M. Born. Z. Phys.*, 1926, 38, 803; 1926, 40, 167.

¹⁵⁷ *M. Born. Gött. Nachr.*, 1926, 146.

¹⁵⁸ Наст. изд., с. 150.

КОММЕНТАРИИ¹

КВАНТОВАНИЕ КАК ЗАДАЧА О СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЯХ

Первое сообщение

Первая часть фундаментальной статьи Шредингера, в которой были заложены основы волновой механики. Существует обширная историко-научная и мемориальная литература, посвященная этому выдающемуся событию в развитии физики. Назовем некоторые работы, используемые в дальнейшем наиболее часто: Э. Шредингер. Новые пути в физике. М., «Наука», 1971; *M. Jammer*. Conceptual development of quantum mechanics. N. Y., McGraw-Hill, 1966; *E. T. Whittaker*. A history of the theories of aether and electricity. V. 2. London, 1953; *E. Guth*. Entwicklung und Grundlagen der Quantenphysik. Handbuch der Physik, Bd. 4, Kap. 5. Berlin, 1929; *A. Lande*. Optik, Mechanik und Wellenmechanik. Handbuch der Physik, Bd. 20, Kap. 8. Berlin, 1928; *G. Ludwig*. Wellenmechanik. Einführung und Originaltexte. Berlin, Akademie-Verlag, 1970; *W. T. Scott*. Erwin Schrödinger. An introduction to his writings. Amherst, 1967; *V. V. Raman, P. Forman*. Why was it Schrödinger who developed de Broglie's ideas? Historical studies in the physical sciences. Ed. by R. McCormach. V. I. Philadelphia, 1969.

В этом сообщении Шредингер постулировал на основе вариационного принципа свое знаменитое уравнение, известное как «не зависящее от времени волновое уравнение Шредингера». Это уравнение описывало закон изменения в пространстве некоторой формально введенной и логарифмически связанной с действием функции, названной впоследствии волновой функцией. Условия квантования при этом сводились к требованию, чтобы эта функция была действительной, однозначной, дважды непрерывно дифференцируемой экстремалью вариационного интеграла, уравнение Лагранжа—Эйлера которого совпадает с волновым уравнением Шредингера. Решение этого уравнения для атома водорода в случае отрицательных значений энергии E привело Шредингера к дискретному спектру собственных значений, совпадающему с энергетическим спектром боровской теории атома водорода.

¹ (с. 11). Метод решения радиального уравнения Шредингера (7) или (7') с помощью преобразования Лапласа был указан Шредингеру Вейлем (см., например: *M. Jammer*. Op. cit., p. 260; о влиянии Вейля на творчество Шредингера см. примечание 4 к статье «Квантование как задача о собственных значениях», четвертое сообщение); формула (12) содержится в упоминаемой Шредингером книге И. Шлезингера, см. также: *В. А. Фок*. Начала квантовой механики. Л., 1932, гл. 5, § 7.

² (с. 15). Шредингер, таким образом, ясно понимал необходимость строгого доказательства полноты набора собственных функций. Используемый им метод решения не позволял дать такого доказательства. Вопрос о полноте системы собственных функций радиального уравнения Шредингера был решен Эддингтоном (*Nature*, 1927, 120, 117) и Т. Грон-

¹ Составлены В. П. Визгиным.

веллом, который дал очень простой способ решения радиального уравнения, а для доказательства полноты использовал свойства замкнутости системы сферических гармоник (*Ann. math.*, 1931, 32, 47, эта работа была закончена в июне 1928 г. и тогда же представлена Американскому математическому обществу).

³ (с. 17). В этих словах заключается зародыш физической интерпретации функции ψ , развитой впоследствии Шредингером. Эта первоначальная интерпретация позволила ему наметить наглядное колебательно-волновое объяснение боровского условия частот посредством биений. Впрочем, вопросам физического истолкования в первом сообщении Шредингер уделяет сравнительно мало внимания, выдвигая на первый план формально-математическую сторону проблемы.

⁴ (с. 17). Это замечание свидетельствует в пользу известной версии о том, что Шредингер сначала пытался получить релятивистское волновое уравнение и на его основе рассчитать энергетические уровни атома водорода (см., например: *П. А. М. Дирак*. Профессор Эрвин Шредингер, в кн.: *Э. Шредингер*, цит. соч., с. 387; *P. A. M. Dirac*. The development of quantum theory. J. R. Oppenheimer memorial prize acceptance speech. N. Y., 1974). Другие аргументы, подтверждающие эту версию, можно найти в статье: *V. V. Raman, P. Forman*. *Op. cit.*

⁵ (с. 17). «Основным исходным толчком» к появлению волновой механики Шредингера послужили, таким образом, известные исследования Л. де Бройля, опубликованные в 1923—1925 гг. (перевод двух основных его работ содержится в сборнике «Вариационные принципы механики». Ред. Л. С. Полак. М., Физматгиз, 1959). Различные версии ознакомления Шредингера с работами де Бройля и начала последующей разработки его идей обсуждаются в цитированных выше работах Джеммера, Рамана и Формэна, Скотта и др.

⁶ (с. 18). Во втором сообщении комментируемой статьи Шредингер дал простой и точный вывод соотношения пропорциональности между частотой и энергией системы, т. е. боровского условия частот, указав, что приближенный характер этого соотношения в первом сообщении связан с использованием «чисто спекулятивных предположений».

⁷ (с. 19). Речь идет, очевидно, об экспериментах В. Вина по разделению между линиями искрового и дугового спектров разработанным им методом канальных лучей (*W. Wien. Ann. Physik*, 1922, 69, 335. См.: *А. Зоммерфельд*. Строение атома и спектры, т. 1. М., ГИТТЛ, 1956, с. 378).

⁸ (с. 19). Имеется в виду известная статья Н. Бора, Г. Крамерса и Дж. Слетера «Квантовая теория излучения», опубликованная в 1924 г. (*Н. Бор*. Избранные научные труды. Т. 1. М., «Наука», 1970, статья 25). Теоретические трудности, о которых говорит Шредингер, были связаны с признанием лишь статистического характера законов сохранения энергии и импульса в атомных процессах. Обсуждение значения этой работы в развитии квантовой теории содержится, например, в работах: *В. Гейзенберг*. Развитие интерпретации квантовой теории; в сб.: «Нильс Бор и развитие физики». М., ИЛ, 1958, с. 23—24; *M. Jammer*. *Op. cit.*, p. 183—189.

Теория Бора—Крамерса—Слетера была опровергнута опытами В. Боте и Г. Гейгера, результат которых оказался «несовместим с боровской интерпретацией комптон-эффекта» (*Z. Phys.*, 1925, 32, 639). Сам Шредингер опубликовал в 1924 г. статью, посвященную анализу этой теории (*Bohr's neue Strahlungstheorie und Energiesatz. — Naturwissenschaften*, 1924, 12, 720). Точка зрения Шредингера изложена в книге: *M. Jammer*. *Op. cit.*, p. 184.

⁹ (с. 20). Речь идет о зоммерфельдовском условии радиального квантования для эллиптических орбит атома водорода:

$$-2\pi i \left(\sqrt{C} - \frac{B}{\sqrt{A}} \right) = n_r h,$$

где

$$A = 2mW, \quad B = mZe^2, \quad C = \frac{n_\varphi^2 h^2}{4\pi^2};$$

$W = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{1}{r^2} p_\varphi^2 \right) - \frac{Ze^2}{r}$ — энергия; n_φ ; n_r — азимутальное и радиальное квантовые числа. (См.: А. Зоммерфельд. *Строение атома и спектры*, т. 1. М., ГИТТЛ, 1956, с. 102—104.)

Обе формы вариационного принципа, используемые Шредингером (формулы (3) и (23), (24)), обсуждаются в книге: А. Зоммерфельд, *цит. соч.*, с. 606—610.

КВАНТОВАНИЕ КАК ЗАДАЧА О СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЯХ

Второе сообщение

Вторая часть статьи, логически предшествующая первой. Именно в этой части Шредингер подробно развил те аргументы и соображения, которые привели его к волновой механике. Речь идет об оптико-механической аналогии, с которой впоследствии Шредингер всегда начинал изложение волновой механики и на основе которой получал обычно свое волновое уравнение (см., например, в настоящем издании статью «Волновая теория механики атомов и молекул», а также «Четыре лекции по волновой механике», читанные в марте 1928 г., в кн.: Э. Шредингер. *Новые пути в физике*). Вопросы оптико-механической аналогии и соответствующий историко-научный материал (Гюйгенс, Гамильтон, С. Ли, Брунс, Ф. Клейн и др.) рассмотрены в указанной выше литературе (Ланде, Гут, Джеммер и др.), а также в книге: Л. С. Полак. *Вариационные принципы механики, их развитие и применение в физике*. М., Физматгиз, 1960.

В заключительном разделе этого сообщения Шредингер на основе своего волнового уравнения решил ряд характерных квантово-теоретических задач: о линейном гармоническом осцилляторе, жестком ротаторе (с закрепленной и свободной осями) и упругом ротаторе — модели двухатомной молекулы. Расчет осциллятора полностью совпадал с соответствующим матрично-механическим результатом Гейзенберга.

¹ (с. 21). Перевод первой заметки Клейна «О новых английских работах по механике» дан в сб.: *Вариационные принципы механики*, с. 513—514. Вторая заметка под названием «Über das Brunsche Eikonale» (1901) опубликована в книге: F. Klein. *Gesammelte mathematische Abhandlungen*. Bd. 2. Berlin, Springer, 1922, Abhandlung 71. Ссылку Зоммерфельда на эти заметки Клейна можно найти в последнем русском издании его книги: А. Зоммерфельд, *цит. соч.*, с. 101.

² (с. 25). Речь идет о статье А. Эйнштейна «К квантовому условию Зоммерфельда и Эпштейна» (1917) (А. Эйнштейн. *Собр. науч. трудов*, т. 3, статья 45). Эйнштейновское

обобщение условий квантования Бора—Зоммерфельда—Эпштейна коротко выражается формулой

$$\int \sum_i p_i dq_i = n_i h,$$

где интеграл берется по всей длине рассматриваемой траектории. Это условие обсуждалось и было использовано де Бройлем (см.: *Л. де Бройль*. Исследования по теории квантов. — В сб.: Вариационные принципы механики, с. 663—664).

³ (с. 27). По видимому, имеется в виду статья Эйнштейна «Квантовая теория одноатомного идеального газа» (1925) (*А. Эйнштейн*. Собр. науч. трудов, т. 3, статья 63, в частности § 8, 9), где Эйнштейн, сопоставляя, согласно де Бройлю, каждой материальной частице волновое поле, говорит, что для описания поведения таких частиц обычная механика недостаточна: «Кроме требуемых механикой отклонений при столкновениях, будут происходить почти так же часто и необъяснимые пока механически отклонения молекул...» (*А. Эйнштейн*. Указ. соч., с. 498).

⁴ (с. 29). Понятия волновых групп или волновых пакетов были введены в оптику П. Дебаем в 1909 г. (*Ann. Physik.*, 1909, 30, 755) и несколько позднее были использованы Лауэ для аналитического представления конусов (или пучков) лучей (*Ann. Physik.*, 1914, 44, 1197); см., например: *M. Jammer*. *Op. cit.*, p. 263. Именно на эти работы и ссылается Шредингер.

⁵ (с. 35). Статья Н. Бора называется «Атомная теория и механика» (1925) (*Н. Бор*. Избранные науч. труды, т. 2, статья 28). Впервые она была опубликована в «*Nature*» (suppl., 1925, 116, 845), а затем ее немецкий перевод был напечатан в «*Naturwissenschaften*» (1926, 14, 1).

⁶ (с. 36). Шредингер, очевидно, имеет в виду попытки объяснения аномального эффекта Зеемана на основе гипотезы о «вращающемся электроны», т. е. на основе понятия спина. Развитие идей, связанных с концепцией спина, детально рассмотрено в статье: *Б. Л. Ван дер Варден*. Принцип запрета и спин. — В сб.: Теоретическая физика 20-го века. М., ИЛ, 1962, с. 231.

⁷ (с. 39). Вопрос об истолковании излучаемых атомом частот как «биений» или «комбинационных тонов» подробно обсуждался в переписке Шредингера и Лоренца, а затем был разработан в четвертом сообщении комментируемой статьи.

⁸ (с. 43). См. примечание 1 к третьему сообщению.

⁹ (с. 47). Здесь Шредингер ссылается на свою работу: *Zur Einsteinischen Gastheorie*. — *Phys. Z.*, 1926, 27, 95. См. с. 172—180 наст. изд.

¹⁰ (с. 49). А. Кратцер — автор исследований по теории спектров двухатомных молекул, а также теории полосатых спектров: *A. Kratzer*. *Z. Phys.*, 1920, 4, 460; 1920, 3, 289; 1923, 16, 353; 1924, 23, 298; *Ann. Physik*, 1923, 67, 127. О значении работ Кратцера см.: *А. Зоммерфельд*. Указ. соч., т. 1, с. 131—134, 641; т. 2, с. 485—495.

¹¹ (с. 50). Формула Эпштейна (или, точнее, Шварцшильда—Эпштейна) для эффекта Штарка первого порядка была почти одновременно и независимо получена П. Эпштейном и К. Шварцшильдом в 1916 г. См.: *А. Зоммерфельд*. Указ. соч., т. 1, с. 262—275 (гл. 6, § 2, формула (30)). Волномеханическая теория штарк-эффекта была разработана Шредингером в третьем сообщении комментируемой статьи.

НЕПРЕРЫВНЫЙ ПЕРЕХОД ОТ МИКРО- К МАКРОМЕХАНИКЕ

Статья имела существенное значение в развитии волновой механики и ее истолковании. Электродинамическая интерпретация волновой функции, развиваемая Шредингером примерно в то же время, когда писалась эта статья, в известной мере опиралась на представления в ней представленные.

Для объяснения того обстоятельства, что заряд электрона может во многих случаях рассматриваться локализованным в достаточно малой области пространства, несмотря на волновой характер ψ -функции, Шредингер искал возможность описания микрочастиц посредством комбинации (вообще говоря, бесконечного ряда) волн или соответствующих волновых функций. Волновые пакеты такого рода в оптике рассматривались Дебаем (1909 г.) и Лауэ (1914 г.) (см. примечание 4 ко второму сообщению). Учитывая факт стабильного существования микрочастиц (прежде всего, электронов в атомных системах), волновые пакеты, их представляющие, следовало конструировать нерасплывающимися. Эту идею Шредингеру удалось реализовать в настоящей статье для линейного гармонического осциллятора. Построенный им волновой пакет, локализованный в окрестности точки $x = A \cos 2\pi\nu_0 t$ (в виде гауссовой функции), был устойчив, т. е. не расплывался в пространстве с течением времени. Предпоследняя фраза статьи свидетельствует о том, что Шредингер надеялся на возможность построения в дальнейшем аналогичных волновых пакетов и для других систем.

Однако вскоре Гейзенберг показал, что осциллятор является в этом отношении замечательным исключением и что соответствующие волновые пакеты в общем случае расплываются (*W. Heisenberg. Z. Phys.*, 1927, 43, 172).

Еще один исключительный случай стабильного пакета был построен Кеннардом и Дарвином — движение электрона в плоскости под влиянием однородного магнитного поля, перпендикулярного к этой плоскости (*E. H. Kennard. Z. Phys.*, 1927, 44, 326; *C. G. Darwin. Proc. Roy. Soc. Lond.*, 1927, A117, 258). Причины устойчивости волновых пакетов осциллятора обсуждались в упомянутой статье Гейзенберга (см. также: *Д. Бом. Квантовая теория. М., Физматгиз, 1961, с. 360—361*).

В последнее десятилетие значительное развитие получил так называемый метод когерентных состояний, «наиболее классических» по своим свойствам. Волновой пакет, построенный Шредингером для осциллятора, был первым примером таких когерентных состояний. Представление о когерентных состояниях и соответствующий метод получили разнообразные плодотворные применения в квантовой теории поля, квантовой оптике, теории сверхтекучести, при исследовании принципиальных вопросов квантовой механики (например, вопроса об операторе фазы, проблемы использования классического языка в квантовой теории и др.), в физике элементарных частиц и т. д. В общем случае когерентные состояния не обязательно характеризуются нерасплывающимися волновыми пакетами, их отличительной чертой является то, что они оказываются собственными состояниями наблюдаемой, собственные значения которой равны сохраняющимся начальным значениям фазовых координат системы. Различные аспекты метода когерентных состояний рассмотрены в сб. «Когерентные состояния в квантовой теории» (М., «Мир», 1972).

ОБ ОТНОШЕНИИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ ГЕЙЗЕНБЕРГА—БОРНА—ИОРДАНА К МОЕЙ

Одна из важнейших работ в истории квантовой механики посвящена установлению формально-математического тождества волновой и матричной квантовой механики. Несмотря на резкое различие этих теорий и даже, в известном смысле, их противоположность (см. с. 57 комментируемой статьи, а также: *M. Jammer. Op. cit.*, p. 271—272), Шредингер был убежден в их тесном родстве и в том, что они «не только не будут противоречить друг другу, но даже наоборот. . . окажутся взаимно дополняющими» (см. второе сообщение, с. 39).

31 марта 1926 г., когда статья Шредингера еще не была опубликована, К. Эккарт из Калифорнийского технологического института представил в Национальную академию наук США статью «The solution of the problem of single oscillator by a combination of Schrödinger's wave mechanics and Lanczos' field theory» (*Proc. Nat. Acad. Sci.*, 1926, 12, 473), в которой на примере линейного осциллятора доказывалась эквивалентность волновой и матричной механик. При этом Эккарт ясно понимал возможность обобщения своего результата на произвольные системы и осуществил это обобщение в статье, законченной 7 июня 1926 г. (*Operators calculus and the solutions of equations of quantum dynamics. — Phys. Rev.*, 1926, 28, 711).

Для построения квантовомеханических матриц Эккарт использовал нормированные собственные функции осциллятора. Известную роль в открытии, сделанном Эккартом, сыграл Эпштейн (см.: *M. Jammer. Op. cit.*, p. 276). Известно, что как для Эккарта, так и для Шредингера одним из важнейших исходных моментов была статья К. Ланцоша, опубликованная в январе 1926 г. (*Z. Phys.*, 1926, 35, 812, см. примечание 10 к комментируемой статье). М. Джеммер (*Op. cit.*, p. 276) обратил внимание на замечание, сделанное Г. Вентцелем в статье (*Z. Phys.*, 1926, 38, 518, поступила в печать 18 июня 1926 г.), что математическая эквивалентность матричной и волновой механик независимо была установлена также Паули (по-видимому, этот результат Паули не опубликовал).

¹ (с. 56). Оценка вклада Дирака в квантовую механику и историко-научный анализ его работ содержатся в указанных выше работах Джеммера, Уиттекера, Гута и др.

² (с. 57). Не менее резко отзывался и Гейзенберг о теории Шредингера (см.: *M. Jammer. Op. cit.*, p. 272).

³ (с. 58). отождествление импульса $\mathbf{p}$ с дифференциальным оператором $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}}$ и установление тождества (1) с матричным перестановочным соотношением для $\mathbf{p}$ и $\mathbf{q}$ — важнейший исходный пункт доказательства эквивалентности. Борн и Винер в конце 1925 г. вплотную подошли к этим результатам (*M. Born, N. Wiener. A new formulation of the laws of quantization of periodic and aperiodic phenomena. — J. math. phys. (M. I. T.)*, 1925—1926, 5, 84; см. также: *Z. Phys.*, 1926, 36, 174).

⁴ (с. 66). Ссылка на второе сообщение. Речь идет о не зависящем от времени уравнении Шредингера (формула (18'') второго сообщения):

$$\operatorname{div} \operatorname{grad} \psi + \frac{8\pi^2}{h^2} (E - V) \psi = 0.$$

⁵ (с. 67). Ссылка на добавление при корректуре к первому сообщению. Имеется в виду вывод уравнения Шредингера из вариационного принципа с действием

$$\int d\tau \left\{ K^2 T \left(q, \frac{\partial \psi}{\partial q} \right) + \psi^2 V \right\}$$

(формула (23) первого сообщения) с дополнительным условием:

$$\int \psi^2 d\tau = 1. \quad (\text{формула (24)}).$$

⁶ (с. 68). Здесь впервые получено уравнение Шредингера в инвариантной (относительно точечных преобразований конфигурационного пространства) форме. Примеры применения и нестационарный аналог этого уравнения можно найти в книге: *Н. Мотт, И. Снеддон*. Волновая механика и ее применения. М., Физматгиз, 1966, § 14.

⁷ (с. 68). Ссылка на первое и второе сообщения.

⁸ (с. 70). Здесь Шредингер ссылается на цитированную выше статью Эйнштейна (см. примечание 3 ко второму сообщению). Шредингер описывает ситуацию, в которой понятие потенциальной энергии, а значит, и обычные формы квантовой механики могут оказаться неприменимыми.

⁹ (с. 72). Ссылка на второе сообщение, где вопросы связи микро- и макромеханики, оптико-механической аналогии и т. п. рассматриваются весьма подробно.

¹⁰ (с. 73). Статья К. Ланцоша (*K. Lanczos. Ueber eine feldmässige Darstellung der neuen Quantenmechanik. — Z. Phys., 1926, 35, 812*, закончена в декабре 1925 г.), о которой здесь идет речь, несомненно сыграла значительную роль в развитии квантовой механики и, особенно, в установлении тождества матричной и волновой механики.

¹¹ (с. 73). Эта попытка была сделана в статье Шредингера «Закон сохранения энергии-импульса для волн материи».

¹² (с. 74). Здесь Шредингер впервые в строгой математической форме развивает свой первый вариант физического истолкования волновой функции, которая принимается комплексной. Под плотностью электричества при этом понимается действительная часть $\psi \frac{d\bar{\psi}}{dt}$; в четвертом сообщении Шредингер использовал более корректное выражение для плотности электричества, а именно $\psi \bar{\psi}$ (см. примечание 8 к четвертому сообщению).

¹³ (с. 74). Ссылка на первое сообщение.

КВАНТОВАНИЕ КАК ЗАДАЧА О СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЯХ

Третье сообщение

В этом сообщении Шредингер разрабатывает ставшую классической квантовомеханическую теорию возмущений, так называемую теорию не зависящих от времени возмущений. Подход Шредингера является обобщением известного метода приближенного расчета акустических колебаний, развитого Рэлеем (*Дж. В. Стретт* (Лорд Рэлей). Теория звука. Т. 1, 2. М., ГИТТЛ, 1955), поэтому его нередко называют методом Рэрея—Шредингера (см., например: *Н. Мотт, И. Снеддон*. Волновая механика и ее применения. М., Физматгиз, 1966, с. 92). Другим аналогом — предшественником теории возмущений Шредингера являются так называемые методы Ньюкома—Линштедта, связанные с применением тригонометрических рядов для решения уравнений небесной механики и детально описанные Пуанкаре (см.: *А. Пуанкаре*. Избранные труды. Т. 1. М., «Наука», 1971, с. 344).

Обобщение, предпринятое Шредингером, заключалось, прежде всего, в рассмотрении дифференциальных уравнений, коэффициенты которых могли быть и переменными, а также в распространении метода на «вырожденные» системы. Шредингеровская теория возмущений, не зависящих от времени, изложена во многих известных книгах по квантовой механике (см., например, упомянутую ранее книгу Мотта и Снеддона, монографию Г. Бете и Э. Солпитера «Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами» (М., Физматгиз, 1960), неоднократно цитированный выше двухтомный трактат Зоммерфельда и др.), а также в названных в самом начале примечаний книгах по истории квантовой механики (см., например: *E. T. Whittaker*. *Op. cit.*, p. 296—297; *M. Jammer*. *Op. cit.*, p. 265—266). Подчеркнем также, что матрично-механический вариант этой теории был развит в классической статье Борна, Гейзенберга и Иордана (*Z. Phys.*, 1926, 35, 557).

В качестве приложения своей теории Шредингер рассмотрел задачу о штарк-эффекте в атоме водорода. Он использовал при этом два способа решения: метод Эпштейна—Шварцшильда, заключающийся в разделении переменных в параболических координатах, и метод, в котором возмущение разлагалось по собственным функциям кеплеровской задачи. Шредингер назвал этот метод «методом Бора», имея в виду расчет штарк-эффекта в статье Бора «Влияние электрических и магнитных полей на спектральные линии» (*Proc. Roy. Soc.*, 1923, 35, 275; см. также: *Н. Бор*. Избранные науч. труды. Т. 1. М., «Наука», 1970, статья 21, с. 401—406). Оба способа привели Шредингера к спектру энергии атома водорода в однородном электрическом поле, вычисляемому по формуле Шварцшильда—Эпштейна, которая была получена последними в 1916 г. (*P. Epstein*. *Phys. Z.*, 1916, 17, 148; *Ann. Physik*, 1916, 50, 489; 1916, 51, 168; *K. Schwarzschild*. *Berl. Ber.*, 1916, April).

Шредингер вычислил также интенсивности различных компонент серии Бальмера в случае штарк-эффекта и получил хорошее совпадение с результатами эксперимента. Вычисления Шредингера хорошо согласуются с последующими более точными измерениями интенсивностей (см., например: *Г. Бете, Э. Солпитер*. Указ. соч., с. 432—437). Матрично-механический расчет штарк-эффекта был дан Паули также в 1926 г. (*Z. Phys.*, 1926, 36, 336).

¹ (с. 82). Шредингер, по-видимому, имеет в виду работу Э. Фюса по волновомеханической теории полосатых спектров (*Ann. Phys.*, 1926, 80, 367), в которой использовались методы, аналогичные теории возмущений. Фюс продолжил свои исследования в статье, опубликованной в следующем томе «*Annalen der Physik*» (1926, 81, 281, см.: *А. Зоммерфельд*. Указ. соч., т. 2, с. 131—132).

Сам Шредингер в обзоре волновой механики для «*Physical Review*» («Волновая теория механики атомов и молекул», 1926 г., см. с. 183—203 наст. изд.) высоко оценивал вклад Э. Фюса в квантовомеханическую теорию возмущений: «Э. Фюс подробно разработал теорию полосатых спектров двухатомных молекул, принимая во внимание взаимодействия вращения и колебания, а также то обстоятельство, что последнее не обладает простым гармоническим спектром... Едва ли возможно было исследовать эту проблему, как и многие подобные ей, при помощи непосредственных методов, так как дифференциальное уравнение (16) (т. е. уравнение Шредингера. — *В. В.*) вообще очень сложно. Но во многих случаях эту трудность удалось преодолеть при помощи теории возмущений, которая была разработана автором совместно с Э. Фюсом».

² (с. 90). О методе Эпштейна см. выше (там же имеется ссылка на оригинальные работы Эпштейна и Шварцшильда).

³ (с. 98). Вычисления Шредингера также хорошо согласуются с результатами экспериментов по наблюдению интенсивностей различных компонент штарк-эффекта атома водорода, проведенных в 1928—1929 гг. Г. Марком и Р. Вирлем (*H. Mark, R. Wierl. Z. Phys.*, 1928, 53, 526; 1929, 55, 156; 1929, 57, 494; см. также: *Г. Бете, Э. Солпитер. Указ. соч.*, § 65).

Современное состояние вопроса об эффекте Штарка (штарк-эффект в сложных атомах, новые методы экспериментального исследования и т. п.) — см.: *С. Э. Фриш. Оптические спектры атомов. М., Физматгиз, 1963; И. И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров. М., 1964; А. М. Бонч-Бруевич, В. А. Ходовой. Современные методы исследования эффекта Штарка в атомах. — УФН, 1967, 93, вып. 1, 71.*

⁴ (с. 105). Согласно, например, Зоммерфельду (указ. соч., т. 2, с. 89, формула (20)), интенсивность излучения пропорциональна четвертой степени частоты излучения. Предположение о пропорциональности интенсивности шестой степени частоты, как подчеркивает здесь сам Шредингер, оказалось необоснованным.

⁵ (с. 105). О боровском методе расчета штарк-эффекта см. выше.

⁶ (с. 115). Эти формулы Паули впервые были опубликованы именно здесь. Сам Паули, по-видимому, не видел необходимости в дополнительной публикации, посвященной их выводу, который можно найти в книге Зоммерфельда (указ. соч., т. 2, гл. 2, § 5). Дальнейшие вычисления в этом направлении проводились Сугиурой (*Y. Sugita. J. phys.*, 1927, 8, 113), который, в частности, нашел выражение интенсивности для серии Пашена, а также Эпштейном, Гордоном, Мак-Лином, Куппером, Слэком, Максвеллом и др. (*А. Зоммерфельд. Указ. соч.*, т. 2, с. 91; *Г. Бете, Э. Солпитер. Указ. соч.*, с. 433).

КВАНТОВАНИЕ КАК ЗАДАЧА О СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЯХ

Четвертое сообщение

В статье Шредингер посредством исключения энергии E из исходного уравнения получает так называемое уравнение Шредингера, зависящее от времени (формула (4')). Затем он распространил развитую им в третьем сообщении стационарную теорию возмущений на возмущения, зависящие от времени, взяв за основу выделенное им ранее нестационарное уравнение. Развитая методика затем применяется им к задаче о дисперсии света; возмущением в этом случае является периодически изменяющаяся потенциальная энергия, связанная с вектором электрической напряженности световой волны, взаимодействующей с атомом. Тем самым Шредингер разрабатывает волномеханический вариант теории дисперсии, совпадающий по своим результатам с матрично-механическим вариантом этой теории, развитым несколько ранее в статьях Крамерса и Гейзенберга (*Z. Phys.*, 1925, 31, 681) и Борна, Гейзенберга и Иордана (*Z. Phys.*, 1926, 35, 557). Он обсуждает также и другие аналогичные явления: отрицательную дисперсию, комбинационное рассеяние света, экспериментально в то время еще не подтвержденные эффекты, связанные с возможным влиянием непрерывного спектра на дисперсию, а также резонансные явления, при которых частота падающей волны практически совпадает с одной из собственных частот атома.

В § 6 Шредингер на основе классического уравнения Гамильтона—Якоби для заряженной частицы в электромагнитном поле путем перехода от выражений $\frac{\partial W}{\partial x}, \dots, \frac{\partial W}{\partial t}$ к дифференциальным операторам $\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, \dots, \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}$ получает релятивистское

обобщение своего уравнения, учитывающее также взаимодействие электрона с электромагнитным полем (формула (36)). Дальнейшая судьба этого уравнения, получившего впоследствии название уравнения Шредингера—Гордона, изложена в примечании 1 к статье «Закон сохранения энергии-импульса для волн материи» настоящего издания.

В заключительном разделе (§ 7) Шредингер обсуждает физический смысл волновой функции ψ , истолковывая $\psi\bar{\psi}$ как весовую функцию в конфигурационном пространстве, описывающую распределение пространственной плотности электрического заряда.

¹ (с. 122). Основы квантовой теории дисперсии были заложены в работах Ладенбурга, Крамерса, Томаса, Куна, Крамерса и Гейзенберга, Гейзенберга—Борна—Иордана и др. (1921—1926 гг.), ссылки на которые можно найти в указ. соч. Зоммерфельда, гл. 5, § 3, в обзорных статьях: *A. Lande*. Указ. соч.; *K. L. Wolf, K. F. Herzfeld*. Absorption und Dispersion. Handbuch der Physik. Bd. 20. Berlin, Springer, 1928. В последней статье содержится обширный материал по истории изучения дисперсии света. Вклад Шредингера в развитие проблемы заключается в разработке волномеханического варианта квантовой теории дисперсии света, основанной на применении теории возмущений, которая была им построена в третьем сообщении и обобщена на нестационарные процессы в комментируемом сообщении.

² (с. 124). Речь идет о явлении отрицательной дисперсии, следующем из дисперсионной формулы Крамерса (*Nature*, 1924, 113, 673) и обнаруженном в 1928 г. Ладенбургом и Копферманом (*Z. Phys. Chem.*, 1928, A139, 375). См. также последующие публикации Ладенбурга с сотрудниками (*Z. Phys.*, 1930, 65, 168, 169).

³ (с. 125). По-видимому, имеется в виду явление комбинационного рассеяния света, предсказанное в рамках старой квантовой теории Смекалом (*Naturwissenschaften*, 1923, 11, 873) и строго рассчитанное в цитируемых Шредингером статьях Крамерса и Гейзенберга и Борна—Гейзенберга—Иордана. Экспериментально было обнаружено в 1928 г. двумя независимыми группами исследователей на разных объектах: Раманом и Кришнаном (*Nature*, 1928, 121, 501), а также Мандельштамом и Ландсбергом (*Naturwissenschaften*, 1928, 16, 557, 772). К этому же открытию и тоже в 1928 г. пришли, по всей вероятности, французские исследователи Кабанн и Рокар (см.: *А. Д. Калыгулов*. Истоки теорий комбинационного рассеяния света. Канд. дис. ИИЕТ АН СССР. М., 1971, где содержится материал по истории комбинационного рассеяния света).

⁴ (с. 127). Здесь Шредингер ссылается на две ранние статьи Г. Вейля, непосредственно примыкающие к развивавшемуся Гильбертом и его учениками направлению функционально-аналитического исследования дифференциальных и интегральных уравнений (см., например: *И. М. Яглом*. Г. Вейль. М., «Знание», 1967, с. 7).

Вообще уместно отметить значительное влияние Г. Вейля на разработку Шредингером волновой механики, которое неоднократно подчеркивал и сам Шредингер. Контакт с Вейлем естественно возник после переезда Шредингера в 1920 г. в Цюрих, где в это время работал Вейль. Можно выделить два основных аспекта исследований Вейля, которые оказались существенными для Шредингера: во-первых, оригинальный и значитель-

ный вклад Вейля в разработку методов решения задач на собственные значения и глубокое знание соответствующего раздела математики; во-вторых, знаменитая единая теория поля Вейля, с большой глубиной и изяществом объединившая эйнштейновскую теорию тяготения с электродинамикой. Влияние последней нашло свое отражение в статье Шредингера, опубликованной еще в 1922 г. и сыгравшей заметную роль в генезисе идей волновой механики (см. статью «Об одном замечательном свойстве квантовых траекторий электрона» и примечание 1 к ней).

Ссылки на Вейля — не только на его работы, но и на непосредственную помощь в решении математических проблем — встречаются в ряде статей Шредингера по волновой механике.

⁵ (с. 127). См. примечание 1 к статье «Квантование как задача о собственных значениях», третье сообщение.

⁶ (с. 128). См. указанную работу Фюса в томе 81 «Annalen der Physik» (примечание 1 к статье «Квантование как задача о собственных значениях», третье сообщение).

⁷ (с. 130). Здесь Шредингер дает набросок теории дисперсии с учетом возможности существования непрерывного спектра. Обзор соответствующих теоретических и экспериментальных (включающих, в частности, цитированные Шредингером работы Герцфельда и Вольфа, а также Каллмана и Марка) исследований можно найти в упомянутой выше статье Герцфельда и Вольфа.¹

⁸ (с. 134). Именно в этом месте Шредингер наиболее обстоятельно развивает свою интерпретацию физического смысла волновой функции. Уже раньше Шредингер для объяснения электромагнитных эффектов, связанных с атомом, придал функции ψ некоторый электромагнитный смысл, а именно смысл функции, описывающей непрерывное распределение электрического заряда в реальном пространстве. Первоначально Шредингер предполагал, что пространственная плотность электричества выражается действительной частью произведения $\psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t}$, где ψ — комплексная функция (в статье «Об отношении квантовой механики Гейзенберга—Борна—Иордана к моей» см. примечание 12 к этой статье). В той же статье, поступившей в печать 18 марта, Шредингер отметил трудность физической интерпретации волновой функции ψ в случае многоэлектронной задачи. Указанная трудность заключалась в том, что ψ -функция при этом должна была рассматриваться не как функция, заданная в реальном трехмерном пространстве, а как функция, заданная в многомерном конфигурационном пространстве. В письме к Планку 8 апреля Шредингер, рассказывая о своем выводе штарк-эффекта, подчеркнул, что он основан на представлении плотности электрического заряда посредством квадрата волновой функции (см. с. 321 наст. изд.). Эта интерпретация у него естественно связывалась с концепцией волновых пакетов, к помощи которых он прибегал, чтобы объяснить локализованность микрочастиц в достаточно малой области пространства.

Обе эти стороны физической интерпретации ψ -функции были предметом обсуждения в переписке Шредингера с Лоренцем и Планком (см. с. 301 и 302 наст. изд.).

⁹ (с. 138). В качестве возможного альтернативного варианта, эквивалентного описанию с помощью комплексных функций и уравнения второго порядка, Шредингер рассматривал описание посредством одного дифференциального уравнения четвертого порядка для действительной волновой функции, равносильного паре уравнений (4'').

О КОМПТОН-ЭФФЕКТЕ

Значение этой работы Шредингера заключается прежде всего в разработке простой и наглядной картины комптон-эффекта на основе представления о дебройлевских волнах, а также в установлении глубокого родства этого явления с рассеянием рентгеновских лучей на кристаллах, описываемым известной формулой Брэгга—Вульфа.

Эффект был открыт А. Комптоном в 1922 г. Затем Комптон и Дебай почти одновременно (1923 г.) дали теоретическое объяснение ему, приписав падающему и рассеянному квантам света импульсы соответственно $h\nu/c$ и $h\nu'/c$. Историю этого открытия и последующего его объяснения Комптоном и Дебаем см.: *E. T. Whittaker. Op. cit.*, p. 208—211; *П. С. Кудряцев. История физики. Т. 3. М., «Просвещение», 1971, с. 368—372; А. Н. Compton. The scattering of x-rays as particles. — Amer. J. Phys., 1961, 29, 817.*

¹ (с. 140). Строгая квантовомеханическая теория комптон-эффекта впервые была дана Дираком (*P. A. M. Dirac. Proc. Roy. Soc., 1926, A114, 405*), который опирался на развитый им операторный формализм квантовой механики (первое изложение этой теории на русском языке, включающее также основы метода Дирака, содержалось в статье: *Б. Н. Финкельштейн. Квантовая механика и явление Комптона. — В сб. «Основания новой квантовой механики». Ред. А. Ф. Иоффе. М.—Л., ГИЗ, 1927*).

Первое изложение полной теории эффекта Комптона на основе волновой механики Шредингера было дано, как указал Шредингер, В. Гордоном и затем развито Г. Вентцелем (*G. Wentzel. Z. Phys., 1927, 48, 1—8; 779—787*). Ссылки на работы других авторов (О. Клейна, Г. Брейта, И. Е. Тамма и др.) по квантовой теории комптон-эффекта и систематическое изложение трех основных методов (метода матричных элементов, метода запаздывающих потенциалов и метода, основанного на уравнении Дирака) расчета комптоновского эффекта можно найти в книге: *А. Зоммерфельд. Указ. соч., т. 2, гл. VIII.*

² (с. 140). Эта аналогия комптоновского эффекта с рассеянием света на звуковой волне, рассчитанным Бриллюэном, является, таким образом, основной идеей, лежащей в основе работы Шредингера.

³ (с. 140). Соотношение Брэгга, или Брэгга—Вульфа, было установлено в феврале 1913 г. независимо У. Г. и У. Л. Брэггами и русским физиком Ю. В. Вульфом. Об истории этого открытия см.: *E. T. Whittaker. Op. cit.*, p. 18—20; *П. С. Кудряцев. Указ. соч., т. 3, с. 203—209.*

⁴ (с. 140). Цитируемая работа Шредингера имела название: «Ueber thermische Gleichgewicht zwischen Licht und Schallstrahlen», т. е. «О термическом равновесии между светом и звуковыми лучами».

⁵ (с. 141). Это хорошо известное релятивистское волновое уравнение, называемое уравнением Шредингера—Гордона, или Клейна—Гордона, или Клейна—Фока (см., например: *P. Roman. Advanced quantum theory. Addison-Wesley, 1965, p. 118*).

⁶ (с. 141). Эта интерпретация физического смысла волновой функции была разработана самим Шредингером, главным образом, в четвертом сообщении (см. примечание 8 к четвертому сообщению).

⁷ (с. 143). О. Винер (O. Wiener) — немецкий физик, впервые установивший существование стоячих световых волн экспериментальным путем (*O. Wiener. Ann. Physik, 1890, 40, 203*).

⁸ (с. 143). Цитируемая статья Паули была посвящена изучению теплового равновесия между газом свободных электронов и излучением абсолютно черного тела. Как было показано Лоренцем и Фоккером, классический механизм обмена импульсом между электронами и излучением (на основе радиационного давления) приводит к нарушению планковского распределения энергии излучения и максвелловского распределения электронов по скоростям. Паули нашел, что этой трудности можно избежать, положив в основу названного механизма обмена элементарную теорию комптоновского эффекта, развитую Комптоном и Дебаем.

ЗАКОН СОХРАНЕНИЯ ЭНЕРГИИ-ИМПУЛЬСА ВОЛН МАТЕРИИ

Шредингер в четвертом сообщении и почти одновременно О. Клейн, В. А. Фок, Кудар и Гордон (на работы которых ссылается в комментируемой статье Шредингер) нашли релятивистское скалярное обобщение уравнения Шредингера, известное в настоящее время как уравнение Шредингера—Гордона (см. примечание 5 к статье «О комптон-эффекте»). В статье «Об отношении квантовой механики Гейзенберга—Борна—Иордана к моей» Шредингер, в соответствии со своей электромагнитной интерпретацией квадрата волновой функции, высказал предположение, что возможно объединение электродинамики с волновой механикой, если в качестве источника векторного электромагнитного поля взять волномеханическое скалярное поле. Аналогичная идея выдвигалась также Ланцосом (Z. Phys., 1926, 35, 812).

Вскоре О. Клейн и Т. де Дондер (1926 г.) обнаружили формальную возможность объединения эйнштейновской теории тяготения и электродинамики на основе введения пятой координаты, что позволило им также получить пятимерную формулировку скалярного релятивистского волнового уравнения второго порядка. Шредингер, ввиду неясности физического смысла пятого измерения и той «пропасти», которая и поныне существует между теорией тяготения и квантовой теорией, предлагает в комментируемой статье весьма естественный вариант объединения волновой механики и электродинамики в терминах лагранжева формализма.

Это объединение, как заметил Шредингер, основано на отождествлении 4-тока

$$\bar{\Psi} \frac{\partial L_m}{\partial \bar{\Psi}_\alpha} - \psi \frac{\partial L_m}{\partial \psi_\alpha} \quad \text{с} \quad i \frac{\partial L_m}{\partial \varphi_\alpha},$$

на возможность чего указал еще Гордон.

Последующие выкладки впервые привели Шредингера к выражению для тензора энергии-импульса и соответствующего закона сохранения для объединенных электромагнитного и «дебройлевского» волновых полей, сохранившему значение до настоящего времени (см., например: Г. Вентцель. Введение в квантовую теорию волновых полей. М., Гостехиздат. М., 1947, с. 85, уравнение (11.5)).

Правда, вскоре выяснилось, что и уравнение Шредингера—Гордона, и синтез, принятый Шредингером, наталкиваются на серьезные затруднения, которые не позволяли интерпретировать это уравнение как релятивистское квантовое уравнение электрона. Во-первых, в эту схему нельзя было включить представление о спине, ввиду скалярности волновой функции и, во-вторых, плотность вероятности ρ из-за того, что уравнение Шре-

дингера—Гордона содержало вторую производную ψ по времени, могла быть отрицательной. По-видимому, Шредингер отдавал себе отчет в этом, но был явно скептически настроен по отношению к вероятностной интерпретации ψ -функции, тем более что в случае электромагнитной интерпретации ρ могла быть отрицательной. Учет же спиновых свойств электрона предполагалось провести при дальнейшем развитии теории.

Более того, Шредингер понимал, что построенная им релятивистская теория едва ли могла быть согласована с опытом даже в простейших задачах, например об атоме водорода (см. заключительную часть комментируемой статьи) и он рассматривал ее, по-видимому, как некоторую предварительную математическую модель, дальнейшая разработка и уточнение которой должны были привести к объединенной релятивистской квантовой теории электрона и электромагнитного поля.

Но развитие пошло по иному пути. Дирак, в отличие от Шредингера, твердо придерживавшийся вероятностной интерпретации ψ -функции, понял неизбежность отказа от описания релятивистского электрона уравнением Шредингера—Гордона, так как наличие в нем второй производной по времени необходимо приводило к отрицательной плотности вероятности. Требование, чтобы искомое уравнение не содержало производных выше первого порядка по времени в сочетании с релятивистским условием равноправного включения в уравнение координат x, y, z, ct и квантовомеханическим условием линейности уравнения, а также требование соответствия (искомое уравнение при больших квантовых числах должно было сводиться к классической релятивистской теории), привело Дирака к его знаменитому релятивистскому уравнению электрона, учитывающему также и полужелый спин электрона (1927 г.).

Долгое время уравнение Дирака считалось единственным адекватным релятивистским квантовомеханическим уравнением, и путь, намеченный в комментируемой статье Шредингера (а также работах Гордона, Клейна, Фока и др.), был признан ошибочным. Только в 1934 г. Паули и Вайскопф (*W. Pauli, V. Weisskopf. Helv. Phys. Acta, 1934, 7, 709*) дали правильную интерпретацию уравнения Шредингера—Гордона, предложив рассматривать его как классическое уравнение поля. Переход же к квантовой теории должен был осуществляться посредством процедуры канонического квантования, подобно квантованию электромагнитного поля, впервые произведенному Гейзенбергом и Паули (*W. Heisenberg, W. Pauli. Z. Phys., 1930, 59, 168*). При этом исчезали все трудности, связанные с отрицательными значениями плотности вероятности, и уравнение Шредингера—Гордона (с электромагнитным взаимодействием) и соответствующее выражение для тензора энергии-импульса были признаны правильными для класса частиц с нулевым спином (мезоны). Реальное же значение все это приобрело к концу 40-х—началу 50-х годов, когда были открыты π -мезоны с нулевым спином. См.: *Г. Бете. Квантовая механика. М., «Мир», 1965, гл. 16, 17; Г. Вентцель. Квантовая теория полей (до 1947 г.). — В сб.: Теоретическая физика 20 века. М., ИЛ, 1962.*

¹ (с. 146). Под вариационной производной понимается левая часть одного из уравнений Лагранжа—Эйлера, в данном случае отвечающая переменной $\bar{\psi}$. См., например: *Р. Курант, Д. Гильберт. Указ. соч., с. 175.*

² (с. 147). Обычное выражение для компонентов 4-тока в электродинамике. Здесь $\mathbf{v}$ — вектор скорости электрического заряда (см., например: *В. Паули. Теория относительности. М.—Л., ОГИЗ, 1947, с. 116*).

³ (с. 147). Возможность использования этого условия, называемого также условием Лоренца, является следствием калибровочной инвариантности уравнений Максвелла:

$$\varphi'_\alpha = \varphi_\alpha + \frac{\partial \chi}{\partial x_\alpha},$$

где χ — произвольная скалярная функция пространства-времени.

Условие $\partial \varphi_\alpha / \partial x_\alpha = 0$ позволяет определить φ_α фактически однозначно, вернее с точностью до $\partial \chi / \partial x_\alpha$, где χ удовлетворяет волновому уравнению: $\Delta \chi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \chi}{\partial t^2} = 0$ (см., например: В. Паули. Указ. соч., с. 120—121).

⁴ (с. 149). По-видимому, термин «скаляр Лауэ» был введен Эйнштейном в 1913 г. для обозначения следа тензора энергии-импульса. См.: А. Эйнштейн. Собр. науч. трудов, т. 1, с. 246—247.

⁵ (с. 149). К этому времени уже вполне было осознана необходимость учета спина электрона, особенно после работы Гейзенберга и Иордана об аномальном эффекте Зеемана (Z. Phys., 1926, 37, 263, поступила в редакцию в марте 1926 г.). См., например, Б. Ван дер Варден. Принцип запрета и спин. — В сб.: Теоретическая физика 20 века.

⁶ (с. 150). См. статью «Квантование как задача о собственных значениях», четвертое сообщение и соответствующий комментарий.

⁷ (с. 150). Указанной работой Борна было положено начало статистической интерпретации квантовой механики. О дальнейшем развитии статистической интерпретации квантовой механики (в частности, о значении упомянутых Шредингером работах Дирака и Гордона) см.: М. Jammer. Op. cit.

ОБМЕН ЭНЕРГИЕЙ В ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКЕ

В этой статье Шредингер развивает концепцию волномеханического описания взаимодействия квантовых систем, основанную на понятии резонанса. Несмотря на успехи волновой механики, в квантовой теории продолжали фундаментальную роль играть понятия и принципы, характеризующие дискретность микропроцессов («квантовые переходы», «стационарные состояния» и т. д.) и связанные с той или иной формой квантового постулата. Шредингеру это представлялось существенной непоследовательностью, и он стремился к выработке единого волнового описания микропроцессов на основе своего волнового уравнения без привлечения казавшихся ему иррациональными «квантовых скачков» (см., например, вводное примечание к статье «Непрерывный переход от микро- к макромеханике»; статью «О комптон-эффекте», посвященную волномеханическому истолкованию эффекта Комптона; весьма резкий отзыв Шредингера о квантовой механике Гейзенберга в статье «Об отношении квантовой механики Гейзенберга—Борна—Иордана к моей», с. 57 и т. д.).

Комментируемая статья, как это указал сам Шредингер, была стимулирована также известной статьей Гейзенберга «Задача многих тел и резонанс в квантовой механике» (Z. Phys., 1926, 38, 411), в которой была развита теория атома гелия и в рамках матричного формализма отмечена квазирезонансная сущность квантового взаимодействия, и, кроме того, цитированными работами Дирака и Борна по усовершенствованию теории возмущений позволившему дать корректное резонансное истолкование взаимодействия

квантовых систем на основе представлений о непрерывном обмене энергией между ними. Резонансные взаимодействия систем с одинаковыми (или весьма близкими) собственными частотами были хорошо известны в классической теории колебаний (см., например: Л. И. Мандельштам. Лекции по теории колебаний. М., «Наука», 1972, лекция 25). Именно этот механизм, согласно Шредингеру, должен был заменить теорию стационарных состояний и квантовых переходов. В «Указаниях к расположению материала», предваряющих изданные в 1927 г. «Abhandlungen...», он заметил по поводу комментируемой статьи, что в ней «делается первая попытка ответить на вопрос, нельзя ли в связи с важным открытием Гейзенберга «квантовомеханических резонансных явлений», а именно таких явлений, которые, по-видимому, должны говорить о существовании дискретных уровней энергии, обойтись без этой гипотезы и понять их как исключительно резонансные явления» (E. Schrödinger. 'Abhandlungen zur Wellenmechanik. 2. Aufl., Lpz., Barth, 1928, S. X.).

Хотя эта волновая интерпретация квантового взаимодействия имела определенное значение, подобно соответствующему истолкованию ряда других специфически квантовых явлений (например эффекта Комптона), она, конечно, не могла полностью заменить теорию стационарных состояний и квантовых переходов, что было подчеркнуто вскоре Бором в его знаменитой лекции в Копенгагене «Квантовый постулат и новейшее развитие атомной теории»: «Можно сказать, что обе формулировки проблемы взаимодействия являются дополнительными в том же самом смысле, как волновое и корпускулярное представление в описании свободных объектов» (Н. Бор. Избранные науч. труды. М., «Наука», 1971, с. 44). Бор также подчеркнул, что волновые интерпретации Шредингера относятся не к реальному трехмерному пространству, а к многомерному конфигурационному, и в этом смысле они не более наглядны, чем матрично-механические представления. «Кроме того, — как заметил далее Бор, — шредингеровская формулировка проблемы взаимодействия, так же как ее формулировка в матричной теории, включает в себя пренебрежение конечной скоростью распространения сил, требуемой теорией относительности» (там же, с. 45).

Резонансная концепция квантового взаимодействия получила развитие в другой известной статье Шредингера, опубликованной в 1952 г. и содержащей ревизию ортодоксальной интерпретации квантовой механики на основе лишь волновых представлений (см. статью «Существуют ли квантовые скачки?» (с. 261)).

¹ (с. 155). См., например: Л. И. Мандельштам. Лекции по теории колебаний. М., «Наука», 1972, лекция 25.

² (с. 156). Ср. раздел 2 статьи «Существуют ли квантовые скачки?» («Постулированный энергетический баланс или явление резонанса?»).

³ (с. 156). Третий и четвертый разделы комментируемой статьи посвящены распространению резонансной концепции Шредингера на статистические ансамбли взаимодействующих квантовых систем. Этот подход, как показал Шредингер, приводит к правильному выражению для энтропии рассматриваемых ансамблей без привлечения вероятностной интерпретации волновой функции.

ОБ ОДНОМ ЗАМЕЧАТЕЛЬНОМ СВОЙСТВЕ КВАНТОВЫХ ТРАЕКТОРИЙ ЭЛЕКТРОНА

Одна из статей Шредингера по старой квантовой теории, сыгравшая, пожалуй, наиболее существенную роль в подготовке идей волновой механики. Высокую оценку этой работе дал Ф. Лондон сразу же после открытия квантовой механики: «Я не хочу лишиться приятной возможности обратить внимание на то, что это резонансное свойство вейлевской меры длины, которое предстает здесь перед нами как характерная теорема волновой механики, было выдвинуто Шредингером в качестве «замечательного свойства квантовых траекторий» уже в 1922 г. и продемонстрировано им на ряде примеров, хотя физическое значение этого в то время не было осознано. Таким образом, уже тогда Шредингер имел в руках характерные квантовомеханические периодичности, которые позднее он открыл с совершенно иной точки зрения» (*Z. Phys.*, 1927, 42, 381). Несколько раньше Лондон еще более восторженно писал об этой статье, обращаясь непосредственно к ее автору (письмо от 10 декабря 1926 г., см. указанную выше статью Рамана и Формэна). В работе Рамана и Формэна комментируемой статье придается весьма существенное значение в генезисе волновой механики; по мнению авторов, эта статья Шредингера объясняет отчасти то обстоятельство, что в 1926 г. идеи де Бройля развил именно Шредингер.

¹ (с. 164). Теория Вейля является первой единой геометризованной (в смысле общей теории относительности) теорией поля, в которой электромагнитное поле, так же как и гравитационное, рассматривается с геометрической точки зрения. Первая публикация Вейля — «Гравитация и электричество» (*Sitzungsber. Kgl. Preuss. Akad. Wiss.*, 1918, 465). Изложение и критический анализ теории Вейля можно найти в следующих работах: *В. Паули*. Теория относительности. М.—Л., ГИТТЛ, 1947; *П. Бергман*. Введение в теорию относительности. М., ИЛ, 1947; *М.-А. Tonnelat*. Les théories unitaires de l'électromagnétisme et de la gravitation. Paris, 1965.

Знаменитая книга Вейля, цитируемая Шредингером и вышедшая первым изданием в 1918 г., была переведена на английский язык в 1952 г.: *H. Weyl*. Space, time, matter. N. Y., 1952. В предисловии к этому изданию сам Вейль дал краткий критический анализ своей теории 1918-го года.

² (с. 162). Это и есть формулировка «замечательного свойства», которое здесь можно было бы назвать «квантовым условием Шредингера—Вейля».

³ (с. 162). Соответствующая публикация Фоккера осталась неизвестной.

⁴ (с. 163). Формула (6a) — выражение теоремы вириала.

⁵ (с. 163). Статья Бора, цитируемая Шредингером, была напечатана на английском языке и называлась «О квантовой теории линейчатых спектров» (*Kgl. Danske Vidensk. Selsk. Skriften*, R. 8, 1918, 4, 1). Немецкий перевод ее был опубликован издательством «Vieweg». К сожалению, не включена в «Избранные научные труды» Бора, вышедшие в 1970—1971 гг. на русском языке. По содержанию близка к более поздней статье Бора (статья 24 указанного издания).

⁶ (с. 163). См., например: *А. Зоммерфельд*. Указ. соч., т. 1, § 4, гл. 6.

⁷ (с. 170). Время затухания — величина, обратная ширине спектральной линии; см., например: *В. Гайтлер*. Квантовая теория излучения. М., ИЛ, 1956, с. 46—51 (классическая теория), § 18 (квантовая теория).

⁸ (с. 170). См., например: *H. Weyl*. Space, time, matter. N. Y., 1952, p. 308.

К ЭЙНШТЕЙНОВСКОЙ ТЕОРИИ ГАЗА

Статья сыграла в подготовке основополагающих работ Шредингера первостепенную роль, выразительная оценка которой дана М. Д. Клейном: «Когда Шредингер в ноябре 1926 г. собрал в одной книге свои составившие эпоху статьи по волновой механике. . . , он, к сожалению, не начал с первого раздела истории: он не включил туда свою первую статью, в которой использовал идеи де Бройля, которая предшествовала серии работ «Квантование как задача о собственных значениях» и которая должна была бы в его книге составить предисловие. Эта статья — «К эйнштейновской теории газа» — была послана в журнал 15 декабря 1925 г., за шесть недель до того, как он закончил первую из своих работ о волновом уравнении и его применениях. Это замечательная статья как по глубине и изяществу, так и по историческому значению» (М. Д. Клейн. Эйнштейн и дуализм волны-частицы. — В кн.: Эйнштейновский сборник, 1966. М., «Наука», 1966, с. 252).

В истории квантовой механики выделяются две основные линии развития: 1) связанная с изучением структуры атома и атомных спектров и 2) связанная с проблемами двойственной природы излучения и статистических свойств этого излучения и газов. Обсуждаемая статья явилась одним из основных мостов между этими двумя линиями. Тем самым и предшествующие работы Шредингера по статистической механике газов и теории излучения могут рассматриваться как определенный этап в подготовке волново-механических идей Шредингера.

Основная задача обсуждаемой статьи — обоснование открытой незадолго до этого статистики Бозе—Эйнштейна на основе волнового представления молекул газа и последующего применения известных статистических методов. Шредингер указывает также на невозможность существования молекул, находящихся в ограниченном объеме, в состоянии покоя. Этот непосредственный результат волнового подхода к частицам является одним из наиболее ранних указаний на существование характерного для квантовой теории понятия нулевой энергии.

В последнем разделе статьи Шредингер впервые обсуждает столь важную для него впоследствии концепцию представления частиц волновыми пакетами, локализованными в пространстве и во времени. Однако законы классической волновой теории не позволяли обеспечить стабильность этих образований, и Шредингер возлагал надежды на некоторую, возможно квантотеоретическую, модификацию этих законов, которая могла бы привести к устранению указанной трудности.

· К ПРИНЦИПУ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ГЕЙЗЕНБЕРГА

Основным результатом этой статьи является обобщение соотношения неопределенностей для двух наблюдаемых (эрмитовых операторов) A и B , полученного Кондоном и Робертсоном в 1929 г. (*E. U. Condon. Science*, 1929, 69, 573; *H. P. Robertson. Phys. Rev.*, 1929, 34, 163). Отличие выражения, найденного Шредингером (формула (9)), от аналогичного соотношения Кондона и Робертсона заключается в первом слагаемом правой части:

$$\left(\frac{\bar{A}B + BA}{2} - A\bar{B} \right)^2.$$

Как отмечает сам Шредингер, ключом к его обобщению явилось рассмотрение свободного движения частиц в волновой механике (начало § 2 статьи), в результате которого

он впервые получил также общие выражения для среднего квадрата координаты и среднего квадрата отклонения координаты (см., например: *В. Паули*. Общие принципы волновой механики. М.—Л., ГИТТЛ, 1947, с. 37—38).

О СВОБОДНОМ ДВИЖЕНИИ В РЕЛЯТИВИСТСКОЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Результаты статьи признаны теперь классическими (*В. Паули*. Указ. соч., с. 254—263; *П. А. Дирак*. Принципы квантовой механики. М., Физматгиз, 1960, § 69; *Г. Бете*. Квантовая механика. М., «Мир», 1965, с. 254—258; *С. Швебер*. Введение в релятивистскую квантовую теорию поля. М., ИЛ, 1963, гл. 4, § 6 и т. д.). В ней Шредингер впервые проинтегрировал уравнение Дирака для свободного электрона. При этом он, как и в предыдущей статье («К принципу неопределенности Гейзенберга»), использовал q -числовой операторный метод, другими словами — гейзенбергово представление. Полученное им в результате интегрирования свободное движение электрона представляло собой сумму усредненного трансляционного движения и так называемого дрожательного движения («Zitterbewegung»). Это загадочное почти-периодическое движение, происходящее со световой скоростью и амплитудой порядка комптоновской длины, т. е. 10^{-11} см, нашло свое полное объяснение лишь после открытия состояний электрона с отрицательной энергией и было интерпретировано как результат интерференции частей волнового пакета, связанных с положительными и отрицательными энергиями (см., например: *В. Паули*. Указ. соч., с. 258). В 1950 г. Фолди и Вусайзен построили такое представление матриц Дирака, в котором оператор координаты, названный ими «оператором среднего положения», не испытывает «дрожательного движения» (см., например: *С. Швебер*. Указ. соч., гл. 4, § 6, а также: *L. L. Foldy, S. Wouthaysen*. Phys. Rev., 1950, 78, 29). Обычный же дираковский оператор координаты при этом колеблется относительно «среднего» с такими частотой и амплитудой, что измерения их потребовали бы энергий и импульсов, способных привести к рождению электронно-позитронных пар.

Ньютон и Вигнер (*R. G. Newton, E. P. Wigner*. Rev. Mod. Phys., 1949, 21, 400) в 1949 г. на основе теоретико-групповых соображений подтвердили результат Шредингера, получив общий вид оператора координаты для частиц со спином $1/2$ (см. также: *С. Швебер*. Указ. соч., гл. 4, § 4).

Трудности, связанные с интерпретацией «дрожательного движения» свободного электрона, вывели Шредингера на ошибочный путь. В течение примерно двух лет он пытался решить проблему отрицательных энергий на основе исключения возможных переходов между состояниями с отрицательными и положительными энергиями. Но и эти работы его имели определенную ценность, так как способствовали уяснению тех затруднений квантово-релятивистского синтеза, которые в полной мере были преодолены лишь в начале 50-х годов трудами, прежде всего, Фейнмана, Швингера, Томонаги, Дайсона и др.

ОСНОВНАЯ ИДЕЯ ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКИ

Речь, произнесенная Шредингером 12 декабря 1933 г. при вручении ему Нобелевской премии. Вместе со Шредингером Нобелевскую премию по физике за 1933 г. получил также П. А. М. Дирак, а годом раньше — В. Гейзенберг. Опубликована в книгах: *W. Heisenberg, E. Schrödinger, P. Dirac*. Die moderne Atomtheorie. Leipzig, 1934, S. 19—36; Les Prix Nobel

en 1933. Stockholm, 1935, p. 1—23. Русский перевод впервые опубликован в книге: *В. Гейзенберг, Э. Шредингер, П. Дирак. Современная квантовая механика*. М.—Л., 1934, с. 41—60. См. также: *Э. Шредингер. Новые пути в физике*. М., 1971, с. 46—59.

В исключительно простой и общедоступной форме здесь рассказывается о той роли, которую в генезисе волновой механики сыграли вариационные принципы Ферма и Гамильтона и оптико-механическая аналогия. Концовка речи свидетельствует о явном предпочтении Шредингером волнового аспекта квантовой механики и о его неудовлетворенности общепринятой к тому времени интерпретацией этой теории.

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ КВАНТОМЕХАНИЧЕСКИХ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ И СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ

Первая из серии статей Шредингера, посвященных разработке и приложениям развитого им метода решения задач на собственные значения, известного сейчас под названием метода факторизации. В настоящее время этот метод, заключающийся в разложении гамильтониана в произведение двух операторов (именно поэтому он и называется методом факторизации, factorization — по-английски означает разложение на множители), хорошо известен и находит разнообразные применения (см., например: *Д. Бом. Квантовая теория*. М., Физматгиз, 1961, гл. 13, разд. 5, 6 и др.). Матричному варианту метода посвящена книга: *Х. Грин. Матричная квантовая механика*. М., Мир, 1968. Аналогичный по существу метод в рамках своего операторного формализма использовал Дирак для линейного гармонического осциллятора (см.: *П. А. М. Дирак. Основы квантовой механики*. М.—Л., ГТТИ, 1932, § 29, 41 или *П. А. М. Дирак. Принципы квантовой механики*. М., Физматгиз, 1960, § 34).

Однако детальное и систематическое развитие на языке волновой механики, т. е. шредингеровского представления, метод факторизации получил в работах Шредингера 1940—1941 гг. Помимо комментируемой статьи, к ним следует отнести еще две: Further studies on solving eigenvalue problems by factorization. — Proc. Roy. Irish. Acad., 1941, A46, 183; The factorization of hypergeometric equation. — Ibid., A47, 53. Впоследствии метод был развит в работе Л. Инфельда и Т. Холла (*L. Infeld, T. Hall. Rev. Mod. Phys.*, 1951, 23, 21), рус. пер. в сб. «Математика», 1969, 10, № 3, 39), а также в работах Х. Грина, ссылки на которые можно найти в упомянутой выше его книге, изданной на английском языке в 1965 г.

КАНОНИЧЕСКОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ КВАНТОМЕХАНИЧЕСКИХ АМПЛИТУД

Опубликована в качестве приложения ко второму изданию книги Шредингера «Статистическая термодинамика» (Кембридж, 1952): *E. Schrödinger. Statistical thermodynamics*. Cambridge, 1957, p. 89—95. Первое издание этой книги вышло в 1946 г. (рус. пер.: *Э. Шредингер. Статистическая термодинамика*. Пер. с англ. и ред. Н. А. Толстого и П. П. Феофилова. М., 1948) и справедливо считается, несмотря на свою краткость, одним из лучших руководств по принципиальным вопросам статистической механики. Публикуемый здесь вывод канонического распределения квантомеханических амплитуд прост, оригинален и демонстрирует как педагогическое искусство Шредингера, так и глубину его физической интуиции.

БИБЛИОГРАФИЯ

I

НАУЧНЫЕ ТРУДЫ Э. ШРЕДИНГЕРА

1. Über die Leitung der Elektrizität auf der Oberfläche von Isolatoren an feuchter Luft. — Wien. Ber., Abt. 2a, 1910, 119, 1215—1223.
2. Zur kinetischen Theorie des Magnetismus. — Wien. Ber., Abt. 2a, 1912, 121, 1305—1329.
3. Studien über Kinetik der Dielektrica, den Schmelzpunkt, Pyro- und Piezoelektrizität. — Wien. Ber., Abt. 2a, 1912, 121, 1937—1973.
4. Höhenverteilung der durchdringenden atmosphärischen Strahlung (Theorie). Beiträge zur Kenntnis der atmosphärischen Elektrizität. — Wien. Ber., Abt. 2a, 1912, 121, 239—2407.
5. Radium A-Gehalt der Atmosphäre in Seeham 1913. — Wien. Ber., Abt. 2a, 1913, 122, 2023—2067.
6. Notiz über die Theorie der anomalen elektrischen Dispersion. — Verhandl. Dtsch. phys. Ges., 1913, 22, 1167—1172.
7. Über die Weiche (β) Sekundärstrahlung von γ -Strahlen. — Wien. Ber., Abt. 2a, 1914, 123, 1319—1367 (Mit K. W. F. Kohlrausch).
8. Zur Dynamik der elastischen Punktreihe. — Wien. Ber., Abt. 2a, 1914, 123, 1679—1697.
9. Über die Schärfe der mit Röntgenstrahlen erzeugten Interferenzbilder. — Phys. Z., 1914, 15, 79—86.
10. Zur Theorie des Debyeeffekts. — Phys. Z., 1914, 15, 497—504.
11. Zur Dynamik elastisch gekoppelter Punktsysteme. — Ann. Physik., 1914, 44, 916—934.
12. Dielektrizität. — In: Handbuch der Elektrizität und Magnetismus (herausgegeben von L. Grätz). Bd. 1. Leipzig, 1914, S. 157—231.
13. Notiz über dem Kapillardruck in Gasblasen. — Ann. Physik, 1915, 46, 419.
14. Zur Theorie der Fall- und Steigversuche an Teilchen mit Brown'scher Bewegung. — Phys. Z., 1915, 16, 289—296.
15. Die Ergebnisse der neueren Forschung über Atom und Molekularwärmen. — Naturwissenschaften, 1917, 5, 537—543, 561—567.
16. Zur Akustik der Atmosphäre. — Phys. Z., 1917, 18, 445—454.
17. Die Energiekomponenten des Gravitationsfeldes. — Phys. Z., 1918, 19, 4—7.
18. Über ein Lösungssystem der allgemeinen kovarianten Gravitationsgleichungen. — Phys. Z., 1918, 19, 20—23.
19. Über ein in der experimentellen Radiumforschung auftretendes Problem der statistischen Dynamik. — Wien. Ber., Abt. 2a, 1918, 127, 237—262.
20. Die Energieinhalt der Festkörper in Lichte der neueren Forschung. — Phys. Z., 1919, 20, 420—428, 450—455, 474—480, 497—503, 523—526.
21. Wahrscheinlichkeitstheoretische Studien betreffend Schweidlersche Schwankungen, besonders der Theorie der Massanordnung. — Wien. Anz., 1919, 27—28; Wien. Ber., Abt. 2a, 1919, 128, 177—237.
22. Über die Kohärenz in weitgeöffneten Bündeln. — Ann. Physik, 1919, 61, 69—86.
23. Theorie der Pigmente von grösster Leuchtkraft. — Ann. Physik, 1920, 62, 603—622.
24. Grundlinien einer Theorie der Farbenmetrik im Tagessehen. — Ann. Phys., 1920, 63, 397—426 (I); 427—456 (II); 481—520 (III).
25. Farbenmetrik. — Z. Phys., 1920, 1, 459—566.
26. Versuch zur modelmässigen Deutung des Terms der scharfen Nebenserien. — Z. Phys., 1921, 4, 347—354.
27. Isotopie und Gibbs'sches Paradoxon. — Z. Phys., 1921, 5, 163—166.
28. Dopplerprinzip und Bohrsche Frequenzbedingung. — Phys. Z., 1922, 23, 301—303.
29. Über die spezifische Wärme fester Körper bei hoher Temperatur und über die Quantelung von Schwingungen endlicher Amplitude. — Z. Phys., 1922, 11, 170—176.
31. Über eine bemerkenswerte Eigenschaft der Quantenbahnen eines einzelnen Elektrons. — Z. Phys., 1922, 12, 13—23.

31. Bohr's neue Strahlungshypothese und der Energiesatz. — Naturwissenschaften, 1924, 12, 720—724.
32. Über den Ursprung der Empfindlichkeitskurven des Auges. — Naturwissenschaften, 1924, 12, 925—929.
33. Gasentartung und freie Weglänge. — Phys. Z., 1924, 28, 41—45.
34. Über das thermische Gleichgewicht zwischen Licht und Schallstrahlen. — Phys. Z., 1924, 25, 89—94.
35. Bemerkung zu zwei Arbeiten des Herrn Elemér Császár über Strahlungstheorie und spezifische Wärmen. — Z. Phys., 1924, 25, 173—174.
36. Über die Rotationswärme des Wasserstoffs. — Z. Phys., 1924, 30, 341—349.
37. Über Farbenmessung (zu T. Oryngs Aufsatz: «Über die physikalische Definition der bunten Körperfarben»). — Phys. Z., 1925, 26, 349—352.
38. Über die subjektiven Sternfarber und die Qualität der Dämmerungsempfindung. — Naturwissenschaften, 1925, 13, 373—377.
39. Die wasserstoffähnlichen Spektren von Standpunkt der Polarizierbarkeit des Atomrumpfes. — Ann. Physik, 1925, 77, 43—70.
40. Die Erfüllbarkeit der Relativitätsforderung in der klassischen Mechanik. — Ann. Physik, 1925, 77, 325—336.
41. Über das Verhältnis der Vierfarben zur Dreifarben Theorie. — Wien. Anz., 1925, N 27, 245—246; Wien. Ber., Abt. 2a, 1925, 134, 471—490.
42. Bemerkungen über die statistische Entropiedefinition beim idealen Gas. — Berl. Ber., 1925, 434—441.
43. Die Energiestufen des idealen einatomigen Gasmodells. — Berl. Ber., 1926, 23—36.
44. Das Ehrenfestache Modell der *H*-Kurve (mit K. W. F. Kohlrausch). — Phys. Z., 1926, 27, 306—313.
45. Quantisierung als Eigenwertprobleme. — Ann. Physik, 1926, 79, 361—376 (I); 79, 489—527 (II); 80, 437—490 (III); 81, 109—139 (IV). Первые две части см. в кн.: Вариационные принципы механики. Под ред. Л. С. Полака. М., Физматгиз, 1959, с. 668—704.
46. Über das Verhältnis der Heisenberg—Born—Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen. — Ann. Physik, 1926, 79, 734—756.
47. Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik. — Naturwissenschaften, 1926, 14, 664—666.
48. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. — Phys. Rev., 1926, 28, 1049—1070; Усп. физ. наук, 1927, 7, 176—201.
49. Zur Einsteinschen Gastheorie. — Phys. Z., 1926, 27, 95—101.
50. Spezifische Wärme (Theoretischer Teil). — In: Handbuch der Physik, Bd. 10. Berlin, 1926, S. 275—320.
51. Die Gesichtsempfindungen. — In: Müller—Pouillet's Lehrbuch der Physik, 11 Aufl. Bd. 2, Abt. 1. Braunschweig, 1926, S. 456—460.
52. Über den Comptoneffekt. — Ann. Physik, 1927, 82, 257—264.
53. Der Energieimpulssatz der Materienwellen. — Ann. Physik, 1927, 83, 265—272.
54. Energieaustausch nach der Wellenmechanik. — Ann. Physik., 1927, 83, 956—968.
55. Abhandlungen zur Wellenmechanik. Leipzig, 1927; 2 Aufl. Leipzig, 1928. Англ. пер.: Collected papers on wave mechanics. Glasgow, 1928 (со второго). Франц. пер.: Mémoires sur la mécanique ondulatoire. Avant-propos et notes inédites de l'auteur. Paris, 1933. Содержание: Einleitung. 1. Quantisierung als Eigenwertprobleme (I—IV); 2. Über das Verhältnis der Heisenberg—Born—Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen; 3. Der stetige Übergang von der Mikro- zu Makromechanik; 4. Ueber den Comptoneffekt; 5. Der Energieimpulssatz der Materienwellen; 6. Energieaustausch nach der Wellenmechanik (последние три статьи только во втором издании).
56. Neue Wege in der Physik. — Elektr. Nachrichtentechnik, 1928, 5, 485—488; Elektrotechn. Z., 1929, 50, 15—16.
57. Der Erkenntnistheoretische Wert physikalisches Modellvorstellungen. Jahresber. phys. Vereins Frankfurt am Main, 1928/29, S. 44—51.
58. Four lectures on wave mechanics. Delivered at the Royal Institution London on 5-th, 7-th, 12-th, 14-th March 1928. London, Glasgow, 1928. Нем. пер.: Vier Vorlesungen über Wellenmechanik. Berlin, 1928. Рус. пер.: Четыре лекции по волновой механике. Харьков—Киев, 1936, 40, с.; Новые пути

- в физике. М., «Наука», 1971, с. 273—316.
59. Die Erfassung der Quantengesetze durch kontinuierliche Funktionen. — Naturwissenschaften, 1929, 17, 486—489.
 60. Adresse an Herrn Planck zum 50 Doktorjubiläum am 28 Juni 1929. — Berl. Ber., Philos.-Hist. Kl., 1929, 431—432.
 61. Antrittsrede in der Preussischen Akademie der Wissenschaften vom 4 Juli 1929. — Berl. Ber., 1929, C—CII. In: Max Planck in seinen Akademie-Ansprachen. Berlin, 1948, S. 117—120. Рус. пер. в кн.: М. Планк. Единство физической картины мира. М., 1966, с. 225—227; М. Планк. Избранные труды. М., «Наука», 1975, с. 678, 679.
 62. Was ist ein Naturgesetz? — Naturwissenschaften, 1929, 17, 9—11.
 63. Verwaschene Eigenwertspektre. — Berl. Ber., 1929, 668—682.
 64. Die Wandlung des physikalischen Weltbegriffs. Vortrag im Deutschen Museum München 6/V 1930. Опубликовано впервые в сб.: Was ist ein Naturgesetz? München, 1962, S. 18—26.
 65. Zum Heisenbergschen Unschärfeprinzip. — Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss., 1930, 296—303.
 66. Über die kräftefreie Bewegung in der relativistischen Quantenmechanik. — Sitzungsber. Preuss. Akad. Wiss., 1930, 418—428.
 67. Zur Quantendynamik des Elektrons. — Berl. Ber., 1931, 63—72.
 68. Über die Umkehrung der Naturgesetze. — Berl. Ber., 1931, 144—153.
 69. Spezielle Relativitätstheorie und Quantenmechanik. — Berl. Ber., 1931, 238—247.
 70. Bemerkungen zu der Arbeit von V. Fork «Die inneren Freiheitsgrade des Elektrons». — Z. Phys., 1931, 808—810.
 71. Über Indeterminismus in der Physik. Ist die Naturwissenschaft milieubedingt? Zwei Vorträge zur Kritik der naturwissenschaftlichen Erkenntnis. Leipzig, 1932.
 72. Sur la théorie relativiste de l'électron et l'interprétation de la mécanique quantique. — Ann. Inst. Henri Poincaré, 1932, 2, 269—310.
 73. Mehrdeutigkeit der Wellenfunktionen. — Ann. Physik., 1932, 32, 39—55.
 74. Dirac'sches Elektron im Schwerfeld. — Berl. Ber., 1932, 105—128.
 75. Über das Verhalten des Starkeffekts bei plötzlichen Feldänderungen (mit H. Rausch von Traubenberg und R. Gebauer — experimenteller Teil). — Z. Phys., 1932, 78, 309—317.
 76. Warum sind die Atome so klein? — Forsch. und Fortschr., 1933, 9, 125—126.
 77. Über den zweiten Hauptsatz der Thermodynamik. — Berl. Ber., 1933, 165.
 78. Der Grundgedanke der Wellenmechanik. Nobel Vortrag, gehalten zu Stockholm am 12 Dezember 1933. In: Les Prix Nobel en 1933. Stockholm, 1935, p. 1—3; Die modern Atomtheorie. Leipzig, 1934, S. 19—36. Рус. пер. в кн.: В. Гейзенберг, Э. Шредингер, П. Дирак. Современная квантовая механика. М.—Л., 1934, с. 41—60.
 79. Über die Unanwendbarkeit der Geometrie in Kleinen. — Naturwissenschaften, 1934, 22, 518—520. Под знаменем марксизма, 1935, № 4, 183—186.
 80. Erwin Schrödinger. — In: Les Prix Nobel en 1933. Stockholm, 1935, p. 86—88 (Автобиография).
 81. Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik. — Naturwissenschaften, 1935, 23, 807—812; 823—828; 844—849. Рус. пер.: Под знаменем марксизма, 1936, № 5, 130—156. Усп. химии, 1936, 5, 395—442.
 82. Discussion of probability relations between separated systems. — Proc. Cambridge Philos. Soc., 1935, 31, 555—563.
 83. The absolute field constant in the new field theory (together with M. Born.). — Nature, 1935, 135, 342.
 84. Contribution to Born's new theory of the electromagnetic field. — Proc. Roy. Soc., 1935, A150, 465—477.
 85. Science and the human temperament. London, 1935. Второе издание вышло под названием: Science theory and man. N. Y., 1957. Содержание: 1. Science, art and play; 2. The law of chance; 3. Indeterminism in physics; 4. Is science on fashion of the times? 5. What is a law of nature? 6. Physical science and the temper of the age; 7. Conceptual models in physics and their philosophical value; 8. The fundamental idea of wave mechanics; 9. What is an elementary particle? (последняя только во 2-м изд.).
 86. Quelques remarques au sujet des bases de la connaissance scientifique. — Scientia, 1935, 57, p. 63—68.

87. Phenomenological theory of supra-conductivity. — *Nature*, 1936, 137, 824.
88. Inderterminism and free will. — *Nature*, 1936, 138, 13—14.
89. Probability relations between separated systems. — *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 1936, 32, 446—452.
90. Eigenschwingungen des sphärischen Raums. — *Acta Pontif. Acad. Sci.*, 1937, 2, N 9, 321—364.
91. Bericht über Abhandlungen von V. Fock. — В кн.: VIII Международный конкурс на соискание премии им. Н. И. Лобачевского (1937). Отчет. Казань, 1940, стр. 46—49.
92. Die Mehrdeutigkeit der Wellenfunktion. — *Ann. Physik*, 1938, 32, 49—55.
93. Mean free path of protons in the Universe. — *Nature*, 1938, 141, 410.
94. Sur la théorie du monde d'Eddington. — *Nuovo cimento*, 1938, 15, 246—254.
95. Nature of the nebular red-shift. — *Nature*, 1939, 144, 593.
96. The proper vibrations of the expanding Universe. — *Physica*, 1939, 6, 899—912.
97. A method of determining quantum-mechanical eigenvalues and eigenfunctions. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1940, A46, 9—16.
98. Boolean algebra and probability theory (together with T. S. Broderick). — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1940, A46, 103—112.
99. General theory of relativity and wave mechanics. — *Wiss. en natuurlund. tijds*, 1940, 10, 2—9.
100. Der Aufbau des Universus und der Aufbau der Materie. — *Bull. Soc. philomat. Paris*, 1941, 123, 26—30.
101. Richard Bar. — *Nature*, 1941, 147, 536.
102. Further studies on solving eigenvalue problems by factorization. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1941, A46, 183—206.
103. On the solutions of wave equations for non-vanishing restmass including a source-fuction. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1941, A47, 1—23.
104. Exchange and spin (with a note by J. Hamilton). — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1941, A47, 39—52.
105. The factorization of the hypergeometric equation. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1941, A47, 53—54.
106. Non-linear optics. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1942, A47, 77—117.
107. Dynamics and scattering power of Born's electron. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1942, A48, 91—122.
108. Pentads, tetrads and triads of meson-matrices. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1943, A48, 135—146.
109. Systematics of meson-matrices. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1943, A49, 29—42.
110. The general unitary theory of the physical fields. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1943, A49, 43—57.
111. A new exact solution in non-linear optics. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1943, A49, 59—66.
112. The earth's and the sun's permanent magnetic fields in the unitary field theory. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1943, A49, 135—143.
113. The affine connexion in physical field theories. — *Nature*, 1944, 153, 572—575.
114. Rate of n-fold coincidences (together with L. Janossy). — *Nature*, 1944, 157, 592—593.
115. The point charge in the unitary field theory. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1944, A49, 225—235.
116. Unitary field theory: Conservation identities and relation to Weyl and Eddington. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1944, A49, 237—244.
117. The shielding effect of planetary magnetic fields (together with J. MacConnell). — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1944, A49, 259—273.
118. The union of the three fundamental fields (gravitation, meson, electromagnetism). — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1944, A49, 275—287.
119. Statistical law in nature. — *Nature*, 1944, 153, 704—705.
120. What is life? Cambridge, 1944; 2nd ed., 1945; N. Y., 1956. Нем. пер. в кн.: Was ist Leben? Bern, 1946; 2 Aufl. 1951. Рус. пер. в кн.: Что такое жизнь? М., 1947.
121. The distant affine connexion. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1945, A50, 143—154.
122. Infinitesimal affine connexions with twofold Einstein—Bargmann symmetry (with F. Mautner). — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1945, A50, 223—231.
123. Probability problems in nuclear chemistry. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1945, A51, 1.
124. The general affine field laws. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1946, A51, 41—50.

125. Affine Feldtheorie und Meson. — *Verhandl. Schweiz. naturforsch. Ges.*, 1946, 126, 53—61.
126. Der Geist der Naturwissenschaft. — In: *Eraons Jahrbuch*, 1946, XIV, S. 491—520. Англ. пер. в кн.: *Spirit and Nature. Papers from the Eranos Yearbooks*. N. Y., 1956, p. 322—341.
127. Statistical thermodynamics. A course of seminar lectures, delivered in January-March 1944, at the School of Theoretical Physics, Dublin Institute for Advanced Studies. Cambridge, 1946; 2nd ed. Cambridge, 1952; 3rd ed. Cambridge, 1960. Рус. пер.: *Статистическая термодинамика*. М., 1948. Нем. пер.: *Statistische Thermodynamik*. Leipzig, 1952.
128. The foundations of the theory of probability. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1947, A51, 51—66 (I); 141—146 (II).
129. The relation between metric and affinity. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1947, A51, 147—150.
130. The final affine field laws. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1947, A51, 163—179 (I); 1948, A51, 205—216 (II); 1949, A52, 1—9 (III).
131. Die Besonderheit des Weltbildes der Naturwissenschaft. — *Acta phys. austriaca*, 1947, 1, 201—245.
132. 2400 Jahre Quantentheorie. — *Ann. Physik*, 1948, 3, 43—48.
133. Space-time structure. Cambridge, 1950.
134. Was ist ein Elementarteilchen? — *Endeavour*, 1950, 109—118; Annual report of the Smithsonian Institution, 1951, p. 183—196.
135. Irreversibility. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1950, A53, 189—195.
136. On the differential identities of an affinity. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1951, A54, 79—85.
137. Studies on the non-symmetric generalization of the theory of gravitation. I. — *Communs Dublin Inst. Adv. Studies*, ser. A, 1951, N 6, 28 p.
138. Studies of the generalized theory of gravitation. II: the velocity of light (together with O. Hittmair). — *Communs Dublin Inst. Adv. Studies*, ser. A, 1951, N 8, 15.
139. A combination problem in cosmic rays. — *Proc. Phys. Soc.*, 1951, A44, 1040—1041.
140. The point-charge in the non-symmetric field theory (together with A. Papapetrou). — *Nature*, 1951, 168, 40—41.
141. Dirac's new electrodynamics. — *Nature*, 1952, 169, 538.
142. Relativistic Fourier reciprocity and the elementary masses. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1952, A55, 29—50.
143. Science and humanism; physics in our time. Cambridge Univ. Press., 1952, 67 p.
144. Science and humanism. — *Cambridge Rev.*, 1952, 73, 255.
145. Are there quantum jumps? — *Brit. J. Philos. Sci.*, 1952, 3, 233—242.
146. Unsere Vorstellung von der Materie. — In: *L'homme devant la science. Texte des conférences et des entretiens des Rencontres Internationales de Geneve*. Neuchatel, 1952. — *Merkur*, 1952, 2, 131—145; *Naturwiss. Rundschau*, 1954, 7, 277—282.
147. What is matter? — *Scient. Amer.*, 1953, 189, N 3.
148. La signification de la mécanique ondulatoire. — In: *Lois de Broglie, physicien et penseur*. Paris, 1953, p. 16—32.
149. General theory of relativity and wave mechanics. In: *Scientific Papers presented to Max Born*. Edinburgh—London, 1953, p. 65—74.
150. Relativistic quantum theory. — *Brit. J. Philos. Sci.*, 1954, 4, 328—329.
151. Measurement of length and angle in quantum mechanics. — *Nature*, 1954, 173, 442.
152. Electric charge and current engendered by combined Maxwell—Einstein fields. — *Proc. Roy. Irish Acad.*, 1954, A56, 13—21.
153. Nature and the Greeks. Shearman lectures, delivered at Univ. College London on 24, 26, 28, 31 May 1948, Cambridge, 1954. Нем. пер.: *Die Natur und die Griechen*. Wien, 1955; *Hambourg*, 1956.
154. Orientierung im Weltall (S. 7—11). Erdalter und Weltalter (S. 12—17). Die Kohlenstoffuhr (S. 18—23). Raum und Zeit (S. 24—31). — In: *Orientierung im Weltall (Das Internationale Forum, H. 3)*. Zürich, 1954.
155. Die Atomisten: Leukipp und Demokrit. — *Merkur*, 1955, 9, 815—824.
156. The philosophy of experiment. — *Nuovo cimento*, 1955, 1, 5—15.
157. Thermodynamik relation between frequency shift and broadening. — *Nuovo cimento*, 1955, 1, 63—70.
158. The wave equation for spin 1 in Hamiltonian form. — *Proc. Roy. Soc.*, 1955,

- A229, 39—43 (I); 1955, A232, 435—447 (II).
159. Must the photon mass be zero? (together with L. Bass). — Proc. Roy. Soc., 1955, A232, 1—6; Nuovo cimento, 1956, 4, 825—826.
 160. Expanding Universes. Cambridge, 1956, 93 p.
 161. What is Life? and other scientific Essays. Toronto, 1956.
 162. Might perhaps energy be a merely statistical concept? — Nuovo cimento, 1958, 9, 162—170.
 163. Mind and Matter. The Tarner lectures delivered at Trinity College in October 1956. Cambridge, 1958. Reprinted in 1959, 104 p. Нем. пер.: Geist und Materie. Braunschweig., 1958.
 164. Meine Weltansicht. Wien, 1961; 2 Aufl. Hamburg., 1963, 150 S.
 165. Was ist ein Naturgesetz? München, 1962, 146 S. Содержание: 1. Was ist ein Naturgesetz?; 2. Die Wandelung der physikalischen Weltbegriffs; 3. Unsere Vorstellungen von der Materie; 4. Was ist ein Elementarteilchen?
 166. Die Wellenmechanik. Stuttgart, 1963. В серии: Dokumente der Naturwissenschaft. Abt. Physik, Bd. 3 (herausgegeben von A. Hermann). Содержание: 1. Quantisierung als Eigenwertprobleme (I—IV); 2. Über das Verhältnis der Heisenberg—Born—Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen; Eine Biographie.
 167. Planck, Einstein, Lorentz. Briefe zur Wellenmechanik. Wien, 1963. (Переписка Э. Шредингера с М. Планком, А. Эйнштейном, Г. Лоренцем).

II

ЛИТЕРАТУРА О Э. ШРЕДИНГЕРЕ И ЕГО ТРУДАХ

1. Иоффе А. Ф., Лазарев П. П., Крылов А. Н. Записка об ученых трудах Шредингера. — Изв. АН СССР. Отд-ние физ.-матем. наук., 1928, № 8, с. 621—623.
2. Райнов Т. И. Шредингер и теоретические основы квантовой механики. Соц. реконструкция и наука. 1936, № 4, с. 9—27.
3. Полак Л. С. Вариационные принципы механики, их развитие и применения в физике. М., Физматгиз, 1960, гл. VII, § 3, с. 539.
4. Полак Л. С. Э. Шредингер и возникновение квантовой механики. — В кн.: Шредингер Э. Избранные труды по квантовой механике. М., «Наука», 1976, с. 347.
5. Франкфурт У. И., Френк А. М. Научное творчество Шредингера. — В кн.: Шредингер Э. Новые пути в физике. М., «Наука», 1971, с. 398.
6. Armattoe R. E. G. Homage to three Great Men: Schweitzer, Schrödinger, De Gennaro (Reprinted from «The Londonderry Sentinel»). 1945, 11 p.
7. Basu D., Sil N. C. Erwin Schrödinger. — Science and Culture, 1961, 27, 232—235.
8. Born M. Erwin Schrödinger. — Phys. Bl., 1961, 17, 85—87.
9. Bridicka M. Prof. dr. Erwin Schrödinger. — Pritod vedy škole, 1961, 11, 937—938.
10. Dirac P. A. M. Prof. Erwin Schrödinger. — Nature, 1961, 189, 355—356.
11. Ehrenfels U. R. Erwin Schrödinger. — Österr. Hochschulzeitung, 1955, 7, N 1, 4.
12. Erckmann R. Erwin Schrödinger. — In: Via Regia Nobelpreisträger auf dem Wege ins Atomzeitalter. München—Wien, 1955, S. 370—385.
13. Fiertz M. Erwin Schrödinger (1887—1961). — Vierteljahresschrift naturforsch. Ges. Zürich, 1961, S. 106.
14. Fischer-Hjalmars T. Erwin Schrödinger. — Svensk kem tidskr., 1961, 73, N 2, 76—77.
15. Flamm L. Erwin Schrödinger. — Forsch. und Fortschr., 1961, 35, 250—251; Almanach der Österr. Akad. Wiss., 1961, S. 111.
16. Fues E. Erwin Schrödinger zum Gedenken. — Naturwissenschaften, 1961, 48, 393—394.
17. Gickholm J. und R. Erwin Schrödinger. — In: Die österreichischen Nobelpreisträger. — Österreich-Reihe. Bd. 48. Wien, 1958, S. 51—57.
18. Glasser W. Erwin Schrödinger 70 Jahre. — Phys. Bl., 1957, 13, 373—374.

19. *Hansen J.* Begründer der Wellenmechanik. — In: 25 Nobelpreisträger. Braun-schweig, 1957 (без пагинации).
20. *Heathcote N. H.* Erwin Schrödinger. — In: Nobel prizewinner in physics. N. Y., 1953, p. 313—329.
21. *Heisenberg W.* Erwin Schrödinger. — Jahrb. Bayer. Akad. Wiss., 1961, 194—196.
22. *Heitler W.* Erwin Schrödinger. — In: Biographical Memoirs of Fellows of the Royal Society, v. 7. London, 1961, p. 221—228.
23. *Hermann A.* Erwin Schrödinger. — In: Große Physiker. Stuttgart, 1960, S. 113.
24. *Hermann A.* In memoriam E. Schrödinger. — Praxis Naturwiss., 1961, 10.
25. *Hermann A.* Erwin Schrödinger. Eine Biographie. — In: Schrödinger E. Die Wellenmechanik. Dokumente der Naturwissenschaft, Abt. Physik, Bd. 3. Stuttgart, Battenberg Verlag, 1963, S. 173—192.
26. *Jammer M.* The conceptual development of quantum mechanics. McGraw-Hill, 1966, гл. V, § 3.
27. *Janossy L.* Erwin Schrödinger. — Fiz. szemle, 1961, 11, 99—101.
28. *Kalckar F.* Aarets Nobelpristagere. — Fys. tidsskr., 1934, 32, 1—17.
29. *Katscher F.* Zum 70 Geburtstag von Erwin Schrödinger. — Christ und Welt, 1957, 10, N 32, 10.
30. *Krbek F.* Die Mechanik von Schrödinger. — In: Grundzüge der Mechanik. Lehren von Newton, Einstein, Schrödinger. Leipzig, 1954, S. 102—239.
31. *Laue M.* Zur Verteilung der Nobelpreise am 10 Dezember. — Metallwirtschaft, 1933, 12, 719—720.
32. *Mache H.* Österreichs große Physiker und ihre Spitzenleistungen. — Schriften Pädagog. Inst. Stadt Wien, 1937, H. 13.
33. *Meseel H.* Erwin Schrödinger. — Chemistry and Industry, 1961, N 14, 440.
34. *Murphy J.* Biographical Introduction — In: *Schrodinger E.* Science theory and man. N. Y., 1958, p. IX—XXIV.
35. Erwiderungs des Sekretars Hrn. Planck. (Antwort на вступительную речь Шредингера в Прусской академии наук). Berl. Ber., 1929; in: Max Planck in seinen Akademie-Ansprachen. Berlin, 1948, S. 120—124. Рус. пер. кн.: *Планк М.* Единство физической картины мира. М., 1966, с. 227—230; *Планк М.* Избранные труды. М. «Наука», 1975, с. 680—682.
36. *Rubinowics W.* Erwin Schrödinger. — Postery fiz., 1961, 12, 385—387.
37. *Schneider E.* Von Röntgen zu Einstein. Von Planck zu Heisenberg. Nobelpreisträger der Physik und ihre Entdeckungen. Berlin, 1953, S. 185—191.
38. *Schrödinger A.* Lebensdaten Erwin Schrödingers (1887—1961). — In: Was ist ein Naturgesetz? München, 1962, S. 144—146.
39. *Scott W. T.* Erwin Schrödinger. An Introduction to his writings, Univ. Massachusetts Press, 1967.
40. *Thirring H.* Erwin Schrödinger zum 60 Geburtstag. — Acta physica austriaca, 1947, 1, 105—109.
41. *Thirring H.* Erwin Schrödinger. — Österr. Hochschulzeitung, 1956, 8, N 10, 4.
42. *Thirring H.* Erwin Schrödinger. — Österr. Hochschulzeitung, 1961, 13, N 2, 1.
43. *Thirring H.* Der Weg der theoretischen Physik von Newton bis Schrödinger. — Acta physica austriaca, 1961, 14, 257—291.
44. *Urban P.* Erwin Schrödinger. — Elektrotechn. und Maschinenbau, 1961, 78, 233—234.
45. *Vescan T. T.* Erwin Schrödinger. Studii si cercetari stiin. — Acad. RPR, Fil. Jasi. Fiz. si stiinte tehn., 1961, 12, N 1, 121—124.
46. Erwin Schrödinger. — Annuario Pontif. Acad. Sci., 1936—1937, 1, 669—671.
47. Erwin Schrödinger. — In: Österreicher der Gegenwart. Lexicon schöpferischer und schaffender Zeitgenossen. Wien, 1951, S. 276—277.
48. Erwin Schrödinger. — In: Österreichs Nobelpreisträger. Wien, 1961, S. 105—116.
49. Erwin Schrödinger. — Chimia, 1957, 11, 279.
50. Erwin Schrödinger. — Chemiker-Ztg., 1957, 81, 618.
51. Erwin Schrödinger. — Physics Today, 1961, 14, N 2, 90.
52. Erwin Schrödinger. — Allgemeine Wärmetechnik, 1961, 10, N 4, 76.
53. Erwin Schrödinger. — Chemiker-Ztg., 1961, 85, 94—95.
54. Erwin Schrödinger. — Americana Annual, 1962, 858.

ИМЕННОЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Авенариус Р. 369
 Ампер А. 350
 Араго Д. 350
 Аристарх 263
 Архимед 229, 263, 276
 Бальмер И. 75, 77, 93, 98, 114, 115, 195, 200, 302, 324
 Барнет Дж. 254
 Бауэр А. 343
 Бергман П. 409
 Бете Г. 400, 401, 406, 411
 Бозе Ш. 158, 172, 182, 343, 410
 Больцман Л. 158, 249, 284, 290, 339, 343, 345, 369—371, 391
 Бом Д. 397, 412
 Бонч-Бруевич А. М. 401
 Бор Н. 17, 19, 20, 76, 93, 104, 133, 155, 163—166, 170, 191, 192, 200, 205, 240, 246, 264—266, 272, 292, 305, 307, 308, 313, 324, 332—334, 336, 362, 365, 367, 369, 371, 372, 375, 376, 379, 380, 382—385, 394, 396, 400, 401, 408, 409
 Борн М. 7, 35, 39, 56, 57, 68, 105, 125, 126, 150, 151, 159, 160, 196, 206, 301, 309, 314, 332, 335, 344, 347, 368, 369, 372, 374, 380—382, 386—388, 391, 392, 398, 400—403, 405, 407, 408
 Боте В. 394
 Брейт Г. 218, 221, 404
 Бриллюэн М. 140, 142, 362, 404
 Брунс Г. 359, 360, 395
 Бройль де Л. 7, 18, 25, 28, 35, 51, 56, 139, 141, 143, 145, 148, 151, 156, 172, 176, 181—183, 186, 188, 203, 268, 272, 282, 331, 339, 345, 346, 361—367, 370—374, 376, 378, 379, 388, 394, 396, 409
 Брэгг У. 140, 142—144, 361, 404
 Бэйли К. 254, 259
 Валера де И. 346
 Ван ден Дунгер 141, 145
 Ван дер Варден Б. Л. 396, 407
 Вайскопф В. 406
 Вейль Г. 11, 127, 128, 161, 162, 170, 171, 176, 212, 345, 346, 371, 372, 393, 402, 403, 409
 Вентцель Г. 314, 398, 404—406
 Вигнер Е. П. 263, 411
 Вильсон Ч. 232, 238, 283, 284
 Вин В. 20, 371, 375, 394
 Винер Н. 196, 387, 388, 398
 Винер О. 143, 404
 Вирль Р. 401
 Вольф К. Л. 129, 402, 403
 Вуд Р. Ч. 131
 Вульф Ю. В. 404
 Вусайзен С. 411
 Гайтлер В. 271, 409
 Галилей Г. 261, 276, 337
 Гамильтон У. Р. 9, 20, 21, 25, 26, 29, 30, 32, 34, 37, 38, 67, 68, 133, 145, 146, 184, 186, 187, 197, 214, 231, 232, 289, 292, 296, 325, 348, 350—353, 356—362, 370, 377, 378, 381—384, 395, 402, 412
 Гаудсмит С. 76, 77, 133, 203
 Гаусс К. Ф. 41
 Гейгер Г. 394
 Гейзенберг В. 7, 35, 38, 39, 41, 56—58, 61, 62, 64, 68, 73, 96, 97, 105, 116, 124—126, 151, 154, 155, 170, 196, 200, 202, 206, 209, 213, 216, 229, 292, 301, 309, 314, 329, 332—334, 339, 368, 372, 374—376, 379, 382, 385—389, 394, 395, 397, 398, 400—403, 406—408, 410, 411
 Геллман Г. 225
 Гельмгольц Г. 202, 345, 370
 Герц Г. 22, 257, 268
 Герцфельд К. Ф. 129, 402, 403
 Гиббс Дж. В. 20, 198, 290, 369, 391
 Гильберт Д. 40, 52, 53, 61, 64, 75, 77, 79, 88, 91, 110, 111, 115, 193, 208, 371, 402, 406
 Голдстейн Г. 383
 Гомер 368
 Гонгор де С. Л. 262
 Гордон В. 140, 141, 145, 146, 150, 151, 375, 391, 401, 402, 404—406
 Горн Дж. 12
 Грин Х. 73, 136, 412
 Гронвелл Т. 393
 Грюнейзен Э. 322, 323, 325, 326
 Гут Е. 393, 395, 398
 Гюйгенс Х. 21, 25, 34, 185, 186, 318, 348, 395
 Дайсон Ф. 411
 Дальтон Дж. 263, 284
 Дарвин К. Г. 174, 213, 263, 397
 Дебай П. 26, 29, 174, 181, 182, 345, 361, 365, 368, 374, 396, 397, 404, 405
 Девиссон К. 347
 Демокрит 254, 259, 284
 Джеммер М. 362, 364, 387, 388, 393—397, 400—407
 Джинс Дж. Х. 182

- Дирак П. А. М. 7, 35, 55, 150, 151, 196, 209, 218, 224, 228, 229, 286, 314, 346, 368, 374, 387, 394, 398, 404, 406—408, 411, 412
 Довийе А. 372
 Дондер де Т. 141—145, 405
 Дошлер Ч. 140, 285
 Дорфман Я. Г. 348
 Дюпен Ф. 349, 350
 Жергон Ж. 350
 Зеeman П. 36, 77, 82, 134, 163, 165, 167, 169, 203, 396, 407
 Зоммерфельд А. 20, 21, 26, 34, 43, 45, 49, 76, 92, 133, 134, 170, 186, 187, 209, 278, 323, 361, 365, 367, 372, 375, 381, 384, 389, 394, 396, 400—401
 Инфельд Л. 412
 Иордан П. 35, 39, 56, 57, 68, 105, 125, 126, 151, 154, 196, 301, 309, 314, 374, 382, 386—388, 398, 400—403, 405, 407
 Иоффе А. Ф. 368, 376, 404
 Иулиус В. А. 306
 Йенс Дж. Г. 172
 Кабани Ж. 402
 Каратеодори К. 356
 Картан Э. 359
 Каллманн Г. 129, 403
 Калыгулов А. Д. 402
 Кёлер В. 209
 Кеннард Е. Н. 397
 Кеплер И. 18, 28, 90, 119, 122, 133, 163, 164, 167—169, 240, 244, 294, 296
 Кирхгоф Г. 34, 70, 257
 Клейн М. 372
 Клейн О. 141, 145, 151, 375, 404—406
 Клейн Ф. 21, 186, 348, 350, 359—361, 395, 404
 Кольрауш К. В. 339, 344, 345, 370
 Комптон А. 139, 140, 142—144, 404, 405, 407, 408
 Кондон Э. 210, 410
 Коссель В. 271
 Крамерс Х. А. 19, 76, 102, 124, 125, 169, 170, 202, 326, 369, 389, 394, 401, 402
 Кратцер А. 49, 396
 Крониг Р. 368
 Крылов А. Н. 376
 Кудар Дж. 141, 405
 Кудрявцев П. С. 404
 Куммер Э. 348, 401
 Кун А. 402
 Курант Р. 40, 52, 53, 61, 64, 75, 77, 79, 88, 110, 111, 117, 193, 371, 406
 Кэтле Л. 349
 Лавуазье А. Л. 263
 Лагерр 93, 98, 106, 110, 113
 Лагранж Ж. Л. 21, 22, 145—147, 149, 197, 198, 349, 351—353, 366, 378, 387, 393, 406
 Ладенбург Р. 105, 402
 Лазарев П. П. 376
 Лайман Т. 115
 Ландау Л. 347
 Ланде А. 172, 350, 393, 395, 402
 Ланжевен П. 323, 363, 368
 Ланцош К. 73, 277, 349, 398, 399
 Лаплас П. 12, 22, 44, 106, 136, 193, 196, 198, 373, 393
 Лармор Дж. 163, 167, 169, 350
 Лауэ Д. В. 29, 30
 Лауэ М. 149, 181, 284, 323, 338, 361, 365, 371, 396, 397, 407
 Левкипп 254, 258
 Лившиц Е. 347
 Ли С. 353, 359, 395
 Линдеман Ф. 346
 Лиувилль Ж. 77—79, 83, 116, 377
 Ловитт Е. 359
 Лондон Ф. 271, 409
 Лоренц Г. 58, 73, 142, 147, 148, 150, 218, 278, 285, 290, 301, 308, 315, 320, 324, 368, 390, 396, 403, 404, 407
 Лукреций 259
 Людвиг Г. 383
 Маделунг Э. 368
 Майкельсон А. 363
 Максвелл Дж. К. 58, 73, 147, 148, 178, 205, 206, 290, 359, 362, 369, 390, 391, 401, 406
 Малюс Э. 349
 Мандельштам Л. И. 402, 408
 Марк Г. 128, 401, 403
 Мах Э. 279, 357, 369
 Монж Г. 349
 Мопертюи П. 25, 363
 Мотт Н. 399, 400
 Нейман Дж. 211, 213, 218
 Нернст В. 328
 Ньютон И. 208, 292, 293, 295, 337
 Ньютон Р. Дж. 411
 Паули В. 96, 98, 143, 196, 314, 323, 368, 372, 398, 400, 401, 404, 406, 407, 409, 411
 Пашен Ф. 77, 401
 Планк М. 39, 98, 102, 104, 158, 159, 172, 173, 184, 188, 189, 205, 208, 239, 255, 257, 264, 266, 272, 290, 321—323, 325, 326, 328, 329, 331, 333, 339, 345, 365, 367, 371, 375, 403
 Платон 256
 Полак Л. С. 8, 21, 347, 348, 361, 371, 394, 395
 Поланьи М. 268
 Поуэлл С. П. 282
 Пржибрам К. 301
 Пуанкаре А. 12, 341, 342, 361, 399
 Раман Ч. В. 174, 371, 373, 393, 394, 402, 409
 Рассел Б. 262
 Резерфорд Э. 205, 236
 Рейхе Ф. 105
 Рентген К. 361
 Ридберг Дж. Р. 240, 246
 Робертсон Г. 210, 213
 Рунге И. 26, 187, 361
 Рэлей Дж. (Стретт Дж. В.) 75, 306, 363, 369, 389, 399
 Семон Р. 369
 Синг Дж. 366
 Скотт В. Т. 373, 393, 394
 Слетер Н. Б. 20, 77, 369, 394
 Смекаль А. 389, 402
 Снеддон И. 399, 400

- Снеллиус В. 129, 229, 230
 Собельман И. И. 401
 Сократ 254
 Солпитер Э. 400, 401
 Спиноза Б. 369
 Стиди Э. 359
 Стокс Дж. 362
 Сугиура У. 401

 Тамм И. Е. 404
 Тейлор 113
 Тирринг Х. 263
 Толмен Р. 281
 Толстой Н. А. 412
 Томас Л. 76, 402
 Томонага 411
 Томсон Г. П. 272, 282, 347
 Томсон Дж. Дж. 347
 Тоннела М. А. 409

 Уилсон У. 367, 381
 Уиттекер Е. Т. 21, 168, 186, 393, 398, 400, 404
 Уленбек Дж. Е. 76, 77, 133, 203
 Унзольд А. 77

 Фаррингтон Б. 261, 263
 Фейнман Р. 411
 Феофилов А. П. 412
 Ферма П. 21, 25, 158, 186, 229—231, 233, 348, 364—366, 382, 412

 Финкельштейн Б. Н. 404
 Фламм Л. 176
 Фок В. А. 141, 203, 218, 221, 393, 404, 405, 406
 Фоккер А. Д. 162, 328, 405, 409
 Фолди Л. Л. 411
 Формен П. 371, 373, 393, 394, 409
 Фоулер Р. Г. 174
 Франк Дж. 268, 391
 Френель О. 34, 139, 186, 348
 Френкель Я. И. 385
 Фриш С. Э. 401
 Фурье Ж. 97, 117, 126, 128, 132, 204—206, 208, 209
 Фюс Э. 82, 128, 194, 195, 225, 400, 403

 Хазенёрль Ф. 339, 341, 343, 344, 370
 Хекманн Г. 177
 Ходовой В. А. 401
 Холд Т. 412

 Цвейг С. 347, 370, 373

 Шварц Г. 212
 Шварцшильд К. 34, 396, 400, 401
 Швебер С. 411
 Швингер Ю. 411

 Шопенгауэр А. 369
 Шредингер А. М. 346
 Шредингер Р. 343
 Штарк И. 75, 76, 98, 157, 164, 166—168, 195, 196, 198, 199, 200, 250, 277, 321, 389, 396, 401
 Штурм Ж. 77, 83, 116, 377

 Эдингтон А. 281, 334, 393
 Эккарт К. 388, 398
 Эксерн Ф. 339, 341, 344, 345, 370, 371
 Эпикур 259, 260
 Эпштейн П. 34, 43, 50, 76, 95, 195, 381, 395, 396, 398, 400, 401
 Эйлер Л. 68, 352, 366, 393, 406
 Эйнштейн А. 18, 25, 27, 47, 51, 57, 70, 158, 172, 175, 176, 178, 180, 255, 257, 266, 271, 280, 290, 323, 329—336, 338, 363, 368—373, 375, 376, 396, 399, 403, 407

 Юнг Т. 291, 348

 Яглом И. М. 402
 Якоби К. 21, 29, 33, 34, 38, 292, 325, 366—368, 377, 381, 383, 384, 402

СОДЕРЖАНИЕ

От редактора	7
------------------------	---

ОСНОВОПОЛАГАЮЩИЕ РАБОТЫ ПО ВОЛНОВОЙ МЕХАНИКЕ 1926—1927 гг.

Квантование как задача о собственных значениях. Первое сообщение	9
Квантование как задача о собственных значениях. Второе сообщение	21
Непрерывный переход от микро- к макромеханике	51
Об отношении квантовой механики Гейзенберга—Борна—Иордана к моей	56
Квантование как задача о собственных значениях. Третье сообщение	75
Квантование как задача о собственных значениях. Четвертое сообщение	116
О комптон-эффекте	139
Закон сохранения энергии-импульса волн материи	145
Обмен энергией в волновой механике	151

РАБОТЫ РАЗНЫХ ЛЕТ ПО КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Об одном замечательном свойстве квантовых траекторий электрона . .	161
К эйнштейновской теории газа	172
Волновая теория механики атомов и молекул	183
Представление квантовых законов с помощью непрерывных функций	204
К принципу неопределенности Гейзенберга	210
О свободном движении в релятивистской квантовой механике	218
Основная идея волновой механики	229
Метод определения квантовомеханических собственных значений и собственных функций	239
Каноническое распределение квантовомеханических амплитуд	248

МЕТОДОЛОГИЧЕСКИЕ ВОПРОСЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

2400 лет квантовой теории	254
Существуют ли квантовые скачки?	261
Релятивистская квантовая теория	285

Измерение длины и угла в квантовой механике	287
Философия эксперимента	288

ПРИЛОЖЕНИЕ

Из переписки (переписка Э. Шредингера с М. Планком, А. Эйнштейном, Г. Лоренцем)	301
Вступительная речь Э. Шредингера в Прусской Академии наук	339
Автобиография Э. Шредингера	343
Эрвин Шредингер и возникновение квантовой механики. Л. С. Полак	347
Комментарии	393
Библиография	413
Именной указатель	420

Эрвин Шредингер

Избранные труды по квантовой механике

Утверждено к печати

Редакционной коллегией серии «Классики науки»

Редактор В. А. Никифоровский
 Редактор издательства В. П. Сироткин^а
 Художественный редактор Н. Н. Власик
 Технический редактор Р. Г. Грузинова
 Корректор И. А. Талалай

Сдано в набор 29/IV 1976 г. Подписано к печати 23/IX 1976 г. Формат 70×90¹/₁₆.
 Бумага № 2. Усл. печ. л. 31,0. Уч.-изд. л. 30,8. Тираж 3400. Тип. зак. 1209.
 Цена 2 р. 41 к.

Издательство «Наука». 103717 ГСП, Москва, К-62, Подсосенский пер., 21
 1-я типография издательства «Наука». 199034, Ленинград, В-34, 9 линия, дом 12